

日本結晶学会講習会

「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、東京理科大学 総合研究院

協賛 日本化学会、日本分析化学会、日本薬学会、日本物理学会、応用物理学会、日本セラミックス協会、日本金属学会、鉄鋼協会、軽金属学会、電気化学会、化学工学会、高分子学会、日本結晶成長学会、日本鉱物科学会、日本材料学会、日本表面科学会、日本分析機器工業会、日本放射光学会、粉体工学会、日本顕微鏡学会、日本ゾル-ゲル学会、粉体粉末冶金協会、セメント協会、触媒学会、石油学会、日本原子力学会、(社)化学情報協会(依頼中のものを含む)

期日 平成 27 年 7 月 13,14,15 日

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 (代表)

[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、解析技術のワンランクアップをめざす人にも最適です。
・B コースは粉末 X 線回折法を結晶構造解析のために初めて使う人、とくにリートベルト法の習得を目指す人のためのコースです。粉末法に関する理解を深めたい人にもお勧めします。
・C コースはリートベルト解析の経験者でさらにレベルアップを望む人、未知構造の決定や MEM による電子密度の決定にチャレンジする人向けのコースです。
・A,B,C コースは互いに関係が深く、続けて受講することで粉末 X 線解析の全体像を理解できますが、単独コースの受講も可能です。
・本講習会は 1996 年にスタートし、これまで 11 回開催され、好評を博している講習会です。今回は、6 人の新しい講師を迎え、より実践的で有益な内容にバージョンアップしています。RIETAN-FP によるリートベルト解析を手軽に実行できる GUI ソフトもご紹介します。ご期待ください。

カタログ展示 各メーカーの粉末回折計のカタログ展示を隣接の大会議室で行います。

■7/13 (月) 1 日目 (A コース) 粉末 X 線回折法の実際

- | | |
|--|-------------|
| 1.粉末回折法の原理を理解しよう (東理大) 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 (㈱リガク) 紺谷貴之 | 11:10-12:30 |
| 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 (㈱リガク) 大淵敦司 | 13:30-14:10 |
| 試料調製法、測定条件、構造解析のための測定 | |
| 4.粉末回折データの読み方 (PANalytical) 上村祐一郎 | 14:15-15:25 |
| 測定データの前処理、同定の原理 (ハナワルト法)、ICDD-PDF の使い方、コンピュータによる同定、格子定数計算法 | |
| 5.回折プロファイルの読み方 (名工大) 井田 隆 | 15:35-16:45 |
| 回折プロファイルとは、畳み込みとは、系統誤差と統計誤差、プロファイル関数 | |
| 6.放射光粉末 X 線回折入門 (名工大) 井田 隆 | 16:45-17:20 |
| 放射光とは、光学系、実験室系との比較、実験・解析技術 | |
| 質疑応答 (自由参加) | 17:30 - |

■7/14(火) 2 日目 (B コース) 粉末法によるリートベルト解析入門

- | | |
|--|-------------|
| 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 |
| i) 結晶構造パラメータ、空間群、International Tables の使い方 | |
| ii) 結晶構造因子の計算、消滅則、席占有率、温度因子、フーリエ合成 | |
| 2. リートベルト法の基礎 (物材機構、PANalytical) 泉 富士夫 | 10:40-12:30 |
| 原理、モデル関数、信頼度因子、解析の進め方、定量分析 | |
| 3. パターン分解および周辺プログラムとの連携 (物材機構、PANalytical) 泉 富士夫 | 13:30-14:45 |
| 粉末中性子回折、パターン分解、統合支援環境、VESTA の活用 | |
| 4. RIETAN-FP 利用の手引き (東工大) 八島正知 | 14:50-16:10 |
| RIETAN-FP、入力ファイル(*.ins)の編集、解析の進め方とノウハウ | |
| 5. RIETAN-FP 用 GUI (フィゾニット) 坪田 雅己 | 16:15-16:45 |
| CUI と GUI、*.ins 編集、rietan.exe/App 実行 | |
| 6. 高圧安定酸化物への応用 (大阪府立大) 山田 幾也 | 16:45-17:30 |
| 放射光を利用した構造物性研究 | |
| 質疑応答 (自由参加) | 17:40 - |

■7/15 (水) 3 日目 (C コース) 最新の構造精密化法と未知構造の解析

- | | |
|--|-------------|
| 1. 粉末未知結晶構造解析 (東工大) 植草秀裕 | 9:00-10:25 |
| 指数付けから初期構造モデルの導出まで | |
| 2. 有機結晶解析の実際 (東工大) 藤井 孝太郎 | 10:35-11:50 |
| 有機結晶の試料調製法、解析の手順、構造モデルの導出と精密化 | |
| 3. 無機結晶解析の実際 (岡山大) 神崎 正美 | 12:50-14:05 |
| 代表的解析プログラムと使用上のノウハウ、NMR の応用 | |
| 4. 電子・核密度分布の決定 (科学博物館) 門馬 綱一 | 14:10-15:30 |
| MEM・MPF 解析、MEM 解析プログラム Dysnomia、解析例 | |
| 5. セラミックスの未知・不規則構造の解析 (名工大) 福田 功一郎 | 15:40-16:30 |
| 構造モデルの構築、MPF による構造モデルの修正、電子密度決定 | |
| 6. リチウムイオン二次電池材料の未知構造解析と MEM 解析 (東大) 西村 真一 | 16:30-17:20 |
| 電極材料の構造解析、未知構造解析、リチウム位置の決定 | |
| 質疑応答 (自由参加) | 17:30 - |

◆特徴

講義終了後に自由参加の質疑応答の時間を設定し、参加者の皆様からのご質問に主要講師が徹底的に回答します。講義の未消化部分の徹底理解をめざします。(これまでも恒例で実施しています)。

◆参加費 (各々1 コース、2 コース、3 コースを受講した時の費用)

主共催および指定学会*会員	: 7000、11000、14000 円
協賛学会会員	: 8000、13000、16000 円
一般	: 10000、18000、26000 円
学生	: 4000、6000、8000 円

*日本化学会、日本分析化学会、日本薬学会 (主催賛助会員含む)

※テキストとして「粉末 X 線解析の実際」第 2 版 (朝倉書店、売価 6090 円) を使用します。
おもちでない方は、受講生ひとり 1 冊に限り特別割引価格の 4000 円(税込)で頒布します。

◆定員: 180 名 (先着順) 前回は満員となりましたので、早めの申込をお勧めします。

◆申し込み方法

講習会参加希望者は結晶学会ホームページ上の以下のサイトから Web 申込システムをご利用の上、お申し込みください。

<https://www.bunken.org/crsj/conf201507/Login>

2015 年 3 月 13 日(金) より受け付け開始。

◆申込問合せ先 162-0801 東京都新宿区山吹町 358-5 アカデミーセンター

日本結晶学会ヘルプデスク FAX(03)3368-2827 E-mail: crsj-xray@bunken.co.jp

◆内容問合せ先 〒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

阿部善也、中井 泉 電話(03)3260-4271 FAX(03)5261-4631 E-mail: y.abe@rs.tus.ac.jp

◆ホームページ

日本結晶学会 HP: <http://www.crsj.jp/>

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

泉 富士夫 HP : <http://fujioizumi.verse.jp/>

◆講習会会場のご案内

東京理科大学 1 号館 17 階 記念講堂、特別会議室

JR 飯田橋駅西口改札を出て右手方向（神楽坂方面）に見える白い理科大の建物群の中で一番高い 17 階建ての建物の最上階です。

下記 URL 中の【地図】をご参照下さい。

<http://www.tus.ac.jp/info/access/kagcamp.html>

最寄り駅：JR 飯田橋駅西口（市ヶ谷寄り）歩 5 分

地下鉄飯田橋駅 B3 出口（東京理科大出口）歩 3 分

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、東西線は更に 5 分程度歩きます。