

## 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機構グリーン&セーフティ研究センター

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、日本ゾルーゲル学会、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 25 年 7 月 8,9,10 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、未知構造の解析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 10 回開催され、好評を博している講習会です。今回は、放射光に関する講義と粉末 X 線解析が威力を発揮するリチウムイオン 2 次電池材料に関する講義を新規に開講します。また、RIETAN-FP によるリートベルト解析を手軽に実行できる新しい GUI ソフトもお披露目しますので、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。

#### ■7/8 (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 (株リガク) 藤縄 剛                                 | 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 (株リガク) 紺谷貴之                               | 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) 山路 功                           | 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 |
| プロファイルを決める因子、 $K\alpha_2$ 線の除去、結晶子サイズと歪みの評価、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、実験室系との比較、光学系、実験・解析技術                                 |             |

#### ■7/9 (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. リートベルト解析入門 (名工大) 泉 富士夫	10:40-12:20
原理、モデル関数、信頼度因子、解析の進め方、定量分析	
3. RIETAN-FP 利用の手引き (東工大) 八島正知	13:20 -14:40
RIETAN-FP、入力ファイル( *.ins )の編集、解析の進め方とノウハウ	
4. RIETAN-FP 用 GUI ( (株) フィゾニット) 坪田 雅己	14:45-15:20
CUI と GUI、*.ins 編集、rietan.exe/App 実行	
5. リートベルト解析の応用 (産総研・東北センター) 池田卓史	
入力データ、解析結果の解釈と活用、応用例を通して解析の実際を学ぶ	15:25-16:40:
6. リチウムイオン二次電池材料への応用 (東大) 西村真一	16:45-17:20
電池活物質の構造精密化、反応機構解析	
質疑応答 (自由参加)	17:20 -

### ■7/10 (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. 電子・核密度分布の決定 (科博) 門馬綱一	9:00-10:20
MEM・MPF 解析、新 MEM 解析プログラム Dysnomia の概要、解析例	
2. 放射光・中性子回折データの MPF 解析 (東工大) 八島正知	10:25-11:35
測定法、解析の実例、イオンの拡散経路と化学結合の可視化	
3. 粉末未知結晶構造解析 (東工大) 植草秀裕	12:35-14:00
指数付けから初期構造モデルの導出まで	
4. 有機結晶解析の実際 (理研・基幹研) 橋爪大輔	14:10-15:25
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	
5. 無機結晶解析の実際 (産総研・東北センター) 池田卓史	15:30-16:45
解析における注意と手順、構造モデルの導出と精密化	
6. リチウムイオン二次電池材料の MEM 解析・未知構造解析 (東大) 西村真一	16:45-17:20
新規電極材料の設計、未知構造解析、リチウム位置の決定	
質疑応答 (自由参加)	17:20 -

#### ◆特徴・特典

- i) 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)。
- ii) 現在開発中の RIETAN-GUI の無料版を、一般リリースに先行して B, C コース参加者に無償配布します。
- iii) C コース参加者には、最近リリースされた MEM 解析プログラム Dysnomia の解析例三つ (Powder Diffr. 誌に発表) を参加者限定で配付します。

#### ◆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、12000、15000 円
協賛学会会員	: 9000、14000、17000 円
一般	: 11000、19000、27000 円
学生	: 4000、7000、10000 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 円で頒布します。

◆定員: 160 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://bunken.org/crsj/conf201307/>

2013年3月14日(木)より受け付けを開始しました。

- ◆**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

TEL: 03-5389-6372 FAX: 03-3368-2822 E-mail: [crsj-xray@bunken.co.jp](mailto: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 中井 泉  
〔電話(03)3260-4271(内線 5761), Fax 5261-4631, E-mail: [inakai@rs.kagu.tus.ac.jp](mailto:inakai@rs.kagu.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/xbun/index.htm>

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

グリーン&セーフティ研究センターHP: <http://www.rs.kagu.tus.ac.jp/green/>

- ◆**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）

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、東西線は更に5分程度歩きます。