

## 一般社団法人日本結晶学会講習会

### 「粉末 X 線解析の実際」

**主催** 一般社団法人日本結晶学会

**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 29 年 7 月 12(水),13(木),14(金)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 12 回開催され、好評を博している講習会です。

**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。

#### ■7/12 (水) 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) 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 (株リガク) 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、<br>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 ((株)リガク) 虎谷秀穂                                   | 15:35-16:45 |
| プロファイル関数、個別プロファイルフィッティング、パターン分解 (Pawley 法、Le Bail 法)           |             |
| 6.新定量分析法 ((株)リガク) 虎谷秀穂   | 16:45-17:20 |
| 粉末回折データの積分強度と化学組成情報から各結晶相の重量分率を簡易に計算する                         |             |
| 質疑応答 (自由参加)  | 17:25 -     |

## ■7/13(木) 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) 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 (PANalytical、物材機構) 泉 富士夫 10:40-12:15  
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 と周辺プログラムとの連携 (PANalytical、物材機構) 泉 富士夫 13:15-14:25  
統合支援環境、ALBA、superflip、EXPO、FOX、MEM/MPF 解析
  4. RIETAN-FP 利用の手引き (東工大) 八島正知 14:30-15:40  
RIETAN-FP、入力ファイル(\*.ins)の編集、解析の進め方とノウハウ
  5. リートベルト解析の実際 (産総研・東北センター)池田卓史 15:50-16:50  
実験室系 X 線回折計による測定と解析
  6. リートベルト解析の応用  
放射光を利用した構造物性研究 (大阪府立大) 山田 幾也 16:50-17:40
- 質疑応答 (自由参加) 17:45 -

## ■7/14 (金) 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) 河野正規 10:35-11:45  
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 (産総研・東北センター) 池田卓史 12:45-13:55  
解析における注意と手順、構造モデルの導出と精密化
  4. 粉末回折データの確率論的な解釈と高次元検出器・放射光の利用 (名工大) 井田 隆 13:55-14:55  
ベイズ推定と最小二乗法、シンクロトロン、一次元・二次元検出器
  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 15:00-15:50  
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 15:50-16:40  
電極材料の構造解析、未知構造解析、リチウム位置の決定
  7. PDF を用いた材料の未知構造解析 (NIMS) 富中悟史 16:45-17:40  
良質な回折データが得られないナノ粒子や層状化合物などの構造解析
- 質疑応答 (自由参加) 17:45 -

### ◆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。

おもいでない方は、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://iap-jp.org/crsj/conf/member/login>

2017年3月22日(水)より受け付け開始。

◆注意事項

1. 日本結晶学会の会員として本講習会の受講を希望する場合、先に入会手続きを完了された後、講習会の申込が可能となります。
2. 入会に関しては、入会申込書の提出や入会年度会費振込みとその確認でお時間が必要となるため、早めの入会手続きをお願い致します。
3. 入会年度会費の振込みを確認後、申込に必要な会員番号とパスワードが学会事務局から通知されます。
4. 入会申込書の提出時と入会年度会費振込み時に、学会事務局にメールにて講習会受講希望者である旨をご連絡ください。
5. 講習会申込後の参加区分の変更は基本的に受付致しませんのでご注意ください。

日本結晶学会 HP 入会案内：<http://www.crsj.jp/outline/admission.html>

日本結晶学会事務局 E-mail：[crsj-post@bunken.co.jp](mailto:crsj-post@bunken.co.jp)

◆申込問合先 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](mailto:crsj-xray@bunken.co.jp)

◆内容問合先 〒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](mailto:y.abe@rs.tus.ac.jp)

◆ホームページ

日本結晶学会 HP：<http://www.crsj.jp/>

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7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。