

2024年度 中級者向けZ-Code講習会の開催案内（オンデマンド開催）

2024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。本年は事前に収録した映像を見て学習いただく、オンデマンド方式での開催です。

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。

J-PARC MLF の粉末回折装置を利用される多くの皆様には是非ご参加いただき、これらの解析ツールを構造解析に活用していただきますようご案内致します。なお、Z-Rietveld (Ver.1.1.4) for Windows (Windows 8.1, 10, 11)、Z-Rietveld (Ver. 2.1.2, 2.1.3) for macOS を用います。詳しくは下記の Z-Code web page をご覧ください。

主催：J-PARC センター (JAEA&KEK)
中性子産業利用推進協議会
総合科学研究機構 (CROSS)

協賛：茨城県

- 開催期間：2025年2月4日（火）～2025年3月31日（月）＜講義映像視聴期間＞
- 開催方法：事前に収録した先生方の講義の映像を各自で見えて学習いただきます。
※特設サイトへの URL は参加申込の方に別途お知らせします。
- 参加費：無料。
ただし、中性子産業利用推進協議会に加入していない民間企業に所属されている方には資料 (pdf で配布) 代 2,000 円をご負担いただきます。（申込後、下記口座にお振込み下さい。）
【資料代振込先】
銀行口座：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
- 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。

配信講義一覧

< 講義 >

回折結晶学の基礎やZ-Rietveldのインストール方法を復習したい方はこちらをご覧ください。

- 1) 回折結晶学の基礎 (1) [JAEA・鬼柳亮嗣]
～回折原理（逆格子、構造因子、粉末結晶回折、単結晶回折）～
- 2) 回折結晶学の基礎 (2) [CROSS・石垣 徹]
中性子の発生、分光器、T₀F₁回折法
- 3) 回折結晶学の基礎 (3) [JAEA・鬼柳亮嗣]
～対称性・空間群、軸変換～
- 4) Z-Rietveldを用いた粉末回折データ解析の概要 [CROSS・石川喜久]
- 5) Z-Rietveldのインストールと動作確認 [CROSS・石川喜久]
- 6) 実験室X線回折データなどからのZ-Rietveldで用いる入出力ファイル作成方法 [CROSS・石川喜久]

<実習>

- 1) リートベルト解析を始める (Rietveld解析+Z-3D描画) [CROSS・石川喜久]
実習1 実験室X線回折データの解析 LaB₆
- 2) Z-Rietveldの中級者向け実習 (1) [JAEA・萩原雅人]
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2 CeO₂ iMATERIA BSバンクデータの解析
実習3 Li (Ni, Co)O₂ iMATERIA BSバンクデータの解析
実習4 TiO₂ iMATERIA BSバンクデータの解析
実習5 Al₂O₃ iMATERIA BSバンクデータの解析実
習6 LiCoO₂ 原子炉角度分散型データの解析実習
7 LiCoO₂ 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 CeO₂ 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 Rb₄Cu₁₆I_{7.2}Cl_{12.8}
- 3) Z-Rietveldの中級者向け実習 (2) [CROSS・石川喜久]
Z-RietveldからZ-MEMへのスムーズな流れを実習します。
実習12 BaTiO₃のXRDと中性子データの違いを見る。
- 4) Z-Rietveldの中級者向け実習 (3) [JAEA・萩原雅人]
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 MnF₂、Co₂(OD)₃Br、ErF₃ 磁気構造の解析例
- 5) Z-Rietveldの中級者向け実習 (4) [CROSS・石川喜久]
有効歪みや有効結晶子サイズの計算方法を学びます。
- 6) Z-Rietveldの中級者向け実習 (5) [CSNS・神山 崇]
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
- 7) Z-Rietveldの中級者向け実習 (6) [CSNS・神山 崇]
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。
- 8) Z-Rietveld (Ver. 2.1.2、2.1.3)を用いた構造解析：
複数のヒストグラムを用いたMEM解析、全自動解析 [CSNS・神山 崇]

【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：

<https://forms.gle/LanxENKjDinKXPr29>

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、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

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。
<https://forms.gle/suN9N2uCgSHpY7YF6>

参加の皆様には3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。

<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) 小室又洋(m_komuro@cross.or.jp)

【ご参考】Z-Code web page のご案内

新しいZ-Code Webページの運用を開始しました。ソフトウェアやマニュアルなどを置いております。
一度おいでください。 : <https://z-code-software.com>



以上