



東京理科大学 総合研究機構

エコシステム研究部門



RIST
Research Institute
for Science and Technology
TUS

東京理科大学 総合研究機構

エコシステム研究部門 第3回 セミナー

「最大エントロピー法による

TOF 粉末中性子回折データの解析」

リートベルト解析プログラム GSAS と Z-Rietveld で得られた観測構造因子を MEM で解析する手続きについての実践的な講義と演習を行います。

日時：平成 25 年 6 月 15 日(土) 13:00~16:30

場所：野田キャンパス 講義棟 K301 教室

講演者：

- 泉 富士夫 氏 (国立大学法人 名古屋工業大学

先進セラミックス研究センター)

- 河村 幸彦 氏 (一般財団法人 総合科学研究機構 東海事業センター)

【お問合せ】

理工学部・工業化学科・井手本

04-7124-1501 (代表) 内線 3600 (野田)

プログラム

講演題目：最大エントロピー法による TOF 粉末中性子回折データの解析

日時： 平成 25 年 6 月 15 日(土) 13:00~16:30

場所： 野田キャンパス 講義棟 K301 教室

1. イン트로ダクショントーク 講師：泉 富士夫 (国立大学法人 名古屋工業大学先進セラミックス研究センター)	
13:00-13:15	イントロダクショントーク
2. 講義 講師：河村 幸彦 (一般財団法人 総合科学研究機構 東海事業センター)	
13:15-13:30	a) TOF 粉末中性子回折の概要 パルス中性子源、光学系、タイムフォーカシング、回折強度の計算式、解析における注意点 b) MEM に関する基礎知識 MEM の原理、リートベルト解析と MEM 解析の相違点、 $\sigma(F_0)$ の調節、単位胞の分割数、固溶体の取り扱い、MEM アルゴリズム
3. 実習 講師：河村 幸彦 (前掲)	
13:30-15:00	a) GSAS によるリートベルト解析 Ni (GSAS の配付ファイルに付属) と $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LANSCE の HIPPO で測定) の TOF 粉末中性子回折データを解析する
15:10-16:10	b) Alchemy-Dysnomia-VESTA による MEM 解析と三次元可視化 a) で得られた解析結果を対象とする。
16:15-16:30	c) Z-Rietveld によるリートベルト解析結果からの MEM 解析 Z-Rietveld による CeO_2 の出力ファイルから Dysnomia 用入力ファイルを作成する。



東京理科大学 総合研究機構

エコシステム研究部門

RIST
Research Institute
for Science and Technology
TUS