

第7回 結晶性萌芽材料 粉末回折研究会

日時：2014年12月15日（月）
15：00～16：00

来聴歓迎

入場無料

場所：名古屋工業大学 2号館 C棟 2階 0223(Y) 講義室

講演者

泉 富士夫 名古屋工業大学客員教授

「外部プログラムとの連携を強化した RIETAN-FP」

科学技術ソフトウェアが作者の加齢とともに古ぼけて行き、将来性が危惧されるようになると、ユーザーは漸減していく。そこで、多目的パターンフィッティング・システム RIETAN-FP は絶えず拡張・改良し続けるよう努め、その教育・啓蒙・宣伝活動にも励んできた。最近完成した次期バージョン v2.5 には、外部プログラムとの連携プレーの利便性を向上させるため、次の三機能を追加した：

1. Le Bail 解析 (+ 個別プロファイルフィッティング) の実行後に、最大エントロピー・パターン法プログラム ALBA により重畳反射の積分強度を自動的に改善する。
2. パターン分解後にチャージフリッピング・プログラム superflip 用入力ファイル *.inflip (積分強度を含む) と未知構造解析プログラム EXPO2014 用入力ファイル *.exp のひな形を出力する。いずれもエキスパートの助言に従った内容となっているため、構造モデル構築にすこぶる役立つ。
3. リートベルト解析後に、最大エントロピー法プログラム Dynomia 用入力ファイルのひな形 *.prf と MEM-based Pattern Fitting (MPF) 用スクリプト MPF_multi.command を出力する。

必要に応じて RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境上で *.inflip と *.prf を修正し、ショートカットを押すかボタンをクリックすれば、それぞれチャージフリッピングと MEM 解析に移行できる。また、自動生成した MPF_multi.command をダブルクリックするだけで、MPF 解析がスタートする。

【泉 富士夫 プロフィール】

粉末 X 線・中性子回折の専門家。リートベルト解析プログラム「RIETAN-FP」の開発者。
著書：“粉末回折” 第 5 版 実験化学講座「物質の構造 III 回折」(2006)、「粉末 X 線解析の実際」第 2 版, 中井 泉, 泉 富士夫編, 朝倉書店 (2009) ほか。