

「RIETAN-FP・VENUS システムと 外部プログラムによる粉末構造解析」講習会

2016年7月11日(月)・12日(火)

初日はリートベルト法、パターン分解、結晶構造モデルの構築、最大エントロピー法(MEM)などの粉末回折データ解析技術について初心者向きに講義する。二日目はWindows用RIETAN-FP・VENUS統合支援環境上でWinPLOT, DICVOL, RIETAN-FP, ORFFE, lst2cif, VESTA, cif2ins, ALBA, superflip, EDMA, FOX, Dysnomiaなどによる粉末回折データの前処理(ピークサーチ、指数づけと格子定数の精密化、バックグラウンドの見積もり)、リートベルト解析、RIETAN-FP用入力ファイルへのCIF(Crystallographic Information File)の導入、ハイブリッド・パターン分解、最大エントロピー・パターン解析、チャージフリッピング、電子密度ピークへの原子の割り付け、直接空間法、MPF(MEM-based Pattern Fitting)による電子密度分布の三次元可視化などを実習する。解析技術の習得に資するため、プレゼンテーション用ファイルと実習時の操作を逐一記述した文書を参加者に配付する。

「英文執筆とテキストデータ処理 — 私の流儀」

2016年7月13日(水)

前半は長く英語論文の添削に従事してきた経験に基づいて執筆した理工学一般に通用するチュートリアル「科学英語論文執筆の手引き」(事前に配付)をくくりながら、キーポイントを説明していく。内2ページは日本語文書執筆の心得に割かれている。英文・和文を問わず、私はそのチュートリアルに記したガイドラインに忠実に従って日々、文章を書いている。後半はテキストファイルをgnuplot, L^AT_EX, sed, awkなどフリーソフトウェアでCUI(Character User Interface)を通じて処理することの重要性と効率の高さを説く。応用例として、RIETAN-FPの解析結果からCIF、グラフ、結晶構造図、電子密度分布図などを作成し、それらと付録をL^AT_EXでPDFファイルとして統合し、さらに和訳するという一連の手続きを実演する。