

提出2018年3月20日

研究会名：放射光を用いたその場観察研究会

日 時：2018年3月20日

場 所：日本大学 理工学部 船橋キャンパス 14号館2階1424号室

出席者：高谷 光（京大），杉本邦久（JASRI），本間哲男（JASRI），安田伸宏（JASRI），坂田 誠（JASRI），大場 茂（慶応大），植草秀裕（東工大），笹森貴裕（名市大），箕浦真生（立教大），伊藤 孝憲（日産アーク） 計10名 +日本化学会会員 約200名

議事録

本会は下記のプログラムに沿ってシンポジウム形式で行われた。まずシンポジウムに先立ち、関係メンバーでミーティングを行い放射光利用と各種測定の最近の進歩やビームラインの現状について意見交換を行った。

シンポジウムでは、本会会員（前ページ記載の10名）および日本化学会会員（200名）の参加のもとプログラムに沿って、成果発表と活発な意見交換を行った。

冒頭では元日本結晶学会の会長の坂田誠先生より（名大名誉）、放射光利用の利用の意義について自らの経験をもとにご説明を頂いた。続いて、慶応大学の長場教授より、最近ブラックボックス化している結晶解析プログラム（SHELX）の原理や構造解析の注意点について丁寧に解説を頂いた。その後、東工大の植草准教授より SHELX 解析された構造解析結果について論文投稿時について、どのように記載し、Check CIF をどのように利用するかについて紹介頂いた。その後のセッションでは、最近、重要性の増している非晶質解析と先端電池材料への解析の応用について、JASRI の杉本博士および日産アークの伊藤様からそれぞれ最先端の研究例を基に分かりやすくご紹介を頂いた。その後、3名の講演者に、結晶解析の基礎と応用を軸にご紹介頂いた。JASRI の安田博士からは BL40XU で開発した迅速測定の紹介、名市大の笹森教授からはディスオーダーの多い有機分子の精密構造決定、立教大学の箕浦教授からは空間群決定のコツと双晶解析に関する注意点について、初学者が間違いやすい点などを含めて丁寧に解説を頂いた。

尚、各講演に関してそれぞれの講演内容に関する会場から活発な質疑があり、この分野への関心の高さが再認識された。

13:30- 趣旨説明（JASRI）坂田 誠

13:35- 単結晶 X線 SHELX プログラムの進化と解析法のコツ（慶大）大場 茂

14:05-CheckCIF の使い方と論文投稿における注意（東工大）植草 秀裕

14:35-放射光 X 線による PDF 解析の基礎と実際 (JASRI) 杉本 邦久

15:00-先端電池開発における放射光粉末結晶解析の威力 (日産アーク) ○伊藤 孝憲

15:20-放射光による微小単結晶迅速構造解析 (JASRI) 安田 伸広

15:45-Yadokari-SHELX を使った単結晶 X 線による有機分子の精密構造決定 (名市大)

笹森 貴裕

16:05-結晶構造解析で困ったときは：空間群決定と双晶解析の実例を中心に (立教大理)

箕浦 真生