

**SPring-8 講習会**  
**「産業利用に役立つ XAFS による先端材料の局所状態解析 2021」**

開催趣旨：

主に産業界の方で、SPring-8 において利用実験を計画中の XAFS 分析の中・上級者を対象とした XAFS (X 線吸収微細構造) スペクトル解析法の実習を行う。今回は、球 (マッフィンティン) 近似を用いないフルポテンシャル多重散乱理論による XANES 計算の基礎と内殻励起分光法への応用についての紹介およびフリーの X 線吸収スペクトル計算ソフトによる実習を行う。球近似では実験結果の再現が良くない正四面体構造などにおいて、フルポテンシャルを用いた多重散乱理論によるシミュレーションでは再現性の良い結果が得られることから、多様な材料への適用が期待されている。

理論計算からの XANES スペクトル計算のメリットの一つは、計算するモデル構造を自由に作ることができることである。これにより、EXAFS の情報からだけでは決定しづらい構造モデルの候補のいくつかを XANES スペクトルから推測する手がかりとして提供する。

日時：2021 年 3 月 4 日 (木) 13:00 ~ 3 月 5 日 (金) 15:00

会場：京都リサーチパーク東地区 1 号館 G 会議室 (〒600-8813 京都市下京区中堂寺南町 134)

主催：公益財団法人 高輝度光科学研究センター (JASRI)

共催：SPring-8 利用推進協議会 産業利用研究会

プログラム：

**3 月 4 日 (木) -1 日目**

13:00-15:00 (講義) フルポテンシャル多重散乱理論の基礎と内殻励起分光法への応用

畑田 圭介先生 (富山大学)

15:00-15:30 (休憩)

15:30-17:00 (講義/実習) フルポテンシャル多重散乱プログラム (FPMS) の使用方法について

太田 露子先生 (富山大学)

**3 月 5 日 (金) -2 日目**

9:30-11:30 (講義/実習) XANES 解析多重散乱プログラム (MXAN) の使用方法について

畑田 圭介先生、田村 嘉章先生 (富山大学)

11:30-13:00 (昼食・休憩)

13:00-15:00 (講義/実習) FPMS および MXAN による XANES 解析

太田 露子先生、原 和花先生 (富山大学))

対象：主に産業界の方で SPring-8 の利用実験を計画中の XAFS データ解析中・上級者の方

定員：20 名程度 聴講のみ (ノートパソコン持参無し) での参加は不可。

以 上