

GNXAS ハンズオンセミナーの開催について

今回、GNXAS コードの開発元であるイタリア・カメリーノ大学の Andrea. Di Cicco 教授、および同教授の研究グループの全面的な協力の下、あいちシンクロトロン光センター (AichiSR) で GNXAS のハンズオンセミナーを開催することになりました。

GNXAS は生の実験データを多重散乱 (Multiple Scattering; MS) 計算により厳密にフィッティングする先進的なソフトウェアです。このソフトウェアの代表的な特徴は、近傍原子の影響を考慮したマッフイン・ティン近似された原子ポテンシャルでの光電子の散乱の位相シフトの計算を行なう、散乱における光電子の波動関数の減衰の効果を検討した複素 Hedin-Lundqvist ポテンシャルを選択できる、2 原子、3 原子、4 原子配置に関連する MS シグナルを計算する、等があります。また、複数の吸収端を含む複雑なスペクトルをフィッティングすることが可能、生データを処理することなく直接フィッティングすることが可能、多電子励起を考慮したバックグラウンドの使用が可能、といった特徴があります。

ハンズオンセミナーでは、初日に A. Di Cicco 教授らにより GNXAS の理論的背景について説明していただきます。2 日目、3 日目は GNXAS を実際に操作していただき、解析の手順を習得していただきます。なお、本セミナーは英語で行います。

日時：

2023 年 9 月 11 日(月) 13:30 ~ 2023 年 9 月 13 日(水) 17:00

場所：

9 月 11 日(月) 現地、並びに Zoom によるオンライン開催

9 月 12 日(火) 現地のみ

9 月 13 日(水) 現地のみ

現地：あいちシンクロトロン光センター 2F 大会議室

主催等：

[主催] あいちシンクロトロン光センター

[後援 (予定)] 日本 XAFS 研究会、JST CREST (JPMJCR 1861)

プログラム（予定）：

	9/11(月)	9/12(火)	9/13(水)
10:00 – 12:00		Hands-on: crymol and gnpeak	Hands-on: grxas, rmcgnxas
12:00 – 13:30	LUNCH BREAK		
13:30 – 15:00	GNXAS: Theory	Hands-on: phagen and gnxas	Ph.D. Students presentation
15:00 – 15:30	BREAK		
15:30 – 17:00	GNXAS: Application and advanced data analysis	Hands-on: fitheo	Free hands-on

参加費：

無料

定員：

現地会場：15名まで（3日間通して現地参加される方を優先します）

オンライン参加：100名程度（初日（9/11）のみオンラインでの参加が可能です）

申込期間：

2023年9月1日（金）まで。ただし、定員に達し次第、締め切ります。

申込方法：

こちらの Web ページから申し込みを行ってください。

その他：

・GNXASの動作環境はLinux、Macになりますが、Virtual Box等を利用してWindows環境上でも動作が可能とします。詳細は、9/12、13のセミナー参加者に別途ご案内します。

・オンラインの接続方法は、オンライン参加者に別途案内します。