

粉末結晶構造解析支援ソフトウェアの開発の現状

森嶋隆裕¹, 大石亮子¹, 米村雅雄², 鬼柳亮嗣³,
森一広⁴, 星川晃範², 鳥居周輝¹, 石垣徹², 神山崇¹
KEK¹, 茨城大², 東北大³, 京都大⁴,

粉末結晶物質の研究・開発のフロンティアを目指す当グループでは、BL-08（超高分解能粉末回折実験装置）、BL-20（茨城県材料構造解析装置）など、大強度陽子加速器計画（J-PARC）のパルス中性子ビームを用いた実験装置の建設・整備などのハードウェア面の取り組みを進める一方、結晶構造解析、シミュレーション、結晶構造の可視化など粉末回折実験装置から取得したデータを柔軟かつ簡便に解析処方が可能な支援ソフトウェアの研究・開発を進めている。この支援ソフトウェアの開発作業の現状を報告する。