

目 次

| | |
|--|----|
| 第 1 章 結晶と X 線 | 1 |
| 1.1 結晶と X 線回折 | 1 |
| 1.2 波としての X 線 | 6 |
| 1.3 結晶に X 線が照射されると | 11 |
| 1.3.1 結晶の各点での散乱 | 11 |
| 1.3.2 散乱 X 線の足し合わせ | 13 |
| 第 2 章 X 線回折の幾何学 | 19 |
| 2.1 ベクトル | 19 |
| 2.2 波を数式で表現する | 24 |
| 2.3 X 線の回折 | 28 |
| 2.4 結晶の並進対称性と X 線回折 | 33 |
| 2.4.1 結晶の並進対称性 | 33 |
| 2.4.2 波数ベクトルの基底 \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* | 36 |
| 2.4.3 エヴァルト球 | 41 |
| 2.5 結晶面, 結晶格子面 | 44 |
| 2.5.1 ブラッグの回折条件 | 44 |
| 2.5.2 結晶面, 結晶格子面 | 46 |
| 2.6 座標変換 | 50 |

| | |
|---------------------------|-----|
| 第3章 構造因子 | 55 |
| 3.1 フーリエ変換とフーリエ展開 | 55 |
| 3.1.1 構造因子 | 55 |
| 3.1.2 1次元のフーリエ展開とフーリエ変換 | 56 |
| 3.1.3 1次元フーリエ展開を実際にやってみる | 59 |
| 3.2 3次元のフーリエ変換 | 63 |
| 3.2.1 基底としての《三角関数》とフーリエ展開 | 63 |
| 3.2.2 構造因子の実部と虚部 | 70 |
| 3.3 フーリエ変換 | 77 |
| 3.3.1 フーリエ級数とフーリエ変換 | 77 |
| 3.3.2 フーリエ変換の性質 | 78 |
| 3.3.3 ガウス関数のフーリエ変換 | 80 |
| 3.4 畳み込み | 82 |
| 3.4.1 畳み込み | 82 |
| 3.4.2 デルタ関数 | 88 |
| 3.5 原子1個のフーリエ変換 | 91 |
| 3.5.1 原子散乱因子 | 91 |
| 3.5.2 異常分散 | 96 |
| 3.6 原子位置のゆらぎ | 98 |
| 3.6.1 原子位置のゆらぎを表す関数 | 98 |
| 3.6.2 等方的なゆらぎ | 99 |
| 3.6.3 異方性のゆらぎ | 102 |
| 3.7 X線構造解析の実際 | 106 |
| 3.7.1 構造因子のまとめ | 106 |
| 3.7.2 X線回折測定のあらまし | 107 |
| 3.7.3 準備作業と初期位相決定のあらまし | 109 |

| | | |
|------------|-----------------|------------|
| 3.7.4 | 精密化のあらまし | 110 |
| 3.7.5 | X線の吸収 | 110 |
| 第4章 | 結晶構造の対称性 | 117 |
| 4.1 | 結晶構造における対称操作 | 117 |
| 4.2 | 点群対称操作 | 120 |
| 4.2.1 | 2次元空間の対称要素 | 120 |
| 4.2.2 | 3次元空間の対称要素 | 122 |
| 4.2.3 | 単純な対称要素の組合せ | 124 |
| 4.3 | 並進を伴う《対称操作》 | 126 |
| 4.3.1 | 《対称操作》であるための条件 | 126 |
| 4.3.2 | 並進を伴う《対称操作》 | 127 |
| 4.3.3 | 《対称操作》の組合せ | 129 |
| 4.4 | 結晶系——単位胞の形 | 133 |
| 4.4.1 | 結晶系とはどんな分類か | 133 |
| 4.4.2 | 2次元, 3次元の結晶系 | 135 |
| 4.5 | ブラベーフロック | 140 |
| 4.5.1 | 単純格子と複合格子 | 140 |
| 4.5.2 | ブラベーフロック | 142 |
| 4.5.3 | 複合格子による消滅則 | 147 |
| 4.5.4 | 複合格子と映進面 | 151 |
| 4.6 | 結晶点群 | 154 |
| 4.6.1 | 構造因子の分布の対称性 | 154 |
| 4.6.2 | 32結晶点群 | 158 |
| 4.6.3 | ラウエクラス | 164 |
| 4.7 | 空間群 | 165 |

| | | |
|-------|---------------------------|------------|
| 4.7.1 | 空間群記号の解説 | 165 |
| 4.7.2 | 結晶軸の選び方に依存する空間群記号 | 170 |
| 4.7.3 | 《対称操作》と並進対称操作の組合せ | 172 |
| 4.7.4 | ワイコフ記号と原点選択 | 174 |
| 4.8 | 映進面・らせん軸による消滅則 | 177 |
| 4.8.1 | 映進面・らせん軸による消滅則 | 177 |
| 4.8.2 | 見かけの消滅則 | 179 |
| 4.8.3 | 回折強度のばらつき | 180 |
| 4.9 | 対称心について | 182 |
| 4.9.1 | 対称心のない結晶構造 | 182 |
| 4.9.2 | 中心対称的な構造からの小さなずれ | 185 |
| 付録 | | 191 |
| | 付表 結晶点群, ブラベーフロックで分類した空間群 | 191 |
| | 付図 17 平面群 | 195 |
| 索引 | | 198 |