

目 次

1 概 論

	頁		
1. 1 序 説	1	§ 1.3-8 分子の回転	22
§ 1.1-1 原子を見る眼	1	1. 4 結晶によるX線の回折	23
§ 1.1-2 原子の世界への道	2	§ 1.4-1 結晶による回折	23
1. 2 結晶解析の基礎	4	§ 1.4-2 逆格子	26
§ 1.2-1 3つの基本的事実	5	§ 1.4-3 正格子と逆格子	28
§ 1.2-2 結晶解析の基礎方程式	5	§ 1.4-3 問題	30
§ 1.2-3 実行のための知識	6	§ 1.4-4 結晶構造因子	31
1. 3 X線の散乱	6	1. 5 結晶の回折像	33
§ 1.3-1 波の合成	6	§ 1.5-1 回折像の観測法	33
§ 1.3-1 問題	11	§ 1.5-1 問題	36
§ 1.3-2 X線の電子による散乱	11	§ 1.5-2 限界球	37
§ 1.3-3 電子の集合によるX線の 散乱	12	§ 1.5-3 波長の選択	37
§ 1.3-4 反射球	14	§ 1.5-4 積分強度	39
§ 1.3-5 逆空間	15	1. 6 結果の表現	40
§ 1.3-6 原子による散乱	15	§ 1.6-1 フーリエ合成	40
§ 1.3-7 分子による散乱	17	§ 1.6-2 2次元投影	41
§ 1.3-7 問題	22	§ 1.6-3 正しさの評価	42

2 結晶の対称性

2. 1 基本的概念	43	§ 2.2-4 空間群	51
§ 2.1-1 結晶格子	43	§ 2.2-5 平面群	53
§ 2.1-2 対称要素と対称操作	45	§ 2.2-6 International Tables の 見方	53
§ 2.1-3 併進を持った対称要素	46	§ 2.2-7 軸の変換による記号の変 換	55
2. 2 対称操作の群	47	§ 2.2-7 問題	57
§ 2.2-1 点群と結晶点群	48	2. 3 逆格子の対称性	57
§ 2.2-2 結晶系	48	§ 2.3-1 逆格子の点群	57
§ 2.2-3 空間格子(Bravais(ブラ ベ)格子).	50	§ 2.3-2 反射の多重度	59
§ 2.2-3 問題	51		

§ 2.3-3 逆格子の空間格子	60	§ 2.4-2 晶族の決定	63
2.4 空間群の決定	63	§ 2.4-3 対称要素の判別	64
§ 2.4-1 消滅則による決定	63	§ 2.4-4 左右対掌	65

3 X線回折像の測定

3.1 測定装置	66	3.4 写真法による回折強度の測定	95
§ 3.1-1 装置	66	§ 3.4-1 X線フィルムの性質	96
§ 3.1-2 ワイセンベルグカメラの 使用法	67	§ 3.4-2 強度測定用写真の撮影	98
§ 3.1-3 等傾角法の得失	72	§ 3.4-3 黒さの測定	103
3.1 問題	76	3.5 構造因子 $ F_0 $ の決定	104
3.2 結晶格子と空間群の決定	77	§ 3.5-1 Lorentz 因子, 偏光因子 および吸収補正	104
§ 3.2-1 振動写真の利用	77	§ 3.5-2 層線間の相対尺度の決定	106
§ 3.2-2 0層ワイセンベルグ写真 の解釈	77	§ 3.5-3 絶対尺度の決定	107
§ 3.2-3 高次層線の利用	81	3.6 自動回折計	109
§ 3.2-4 指数づけ	85	§ 3.6-1 自動回折計の必要性	109
§ 3.2-5 Laue 群と空間群の決定	85	§ 3.6-2 ゴニオメーターの基本形 式	110
§ 3.2-6 双晶	86	§ 3.6-3 カウンターと結晶との相 対運動	113
3.2 問題	89	§ 3.6-4 カウンターの特性	115
3.3 格子定数の決定	89	§ 3.6-5 自動制御の方式	117
§ 3.3-1 粗い測定	90		
§ 3.3-2 最小2乗法の利用	91		
3.3 問題	95		

4 構造解析の方法

4.1 最初の手がかり	119	§ 4.2-2 点集合とベクトル集合	131
§ 4.1-1 密度	119	§ 4.2-2 問題	135
§ 4.1-2 特殊位置	120	§ 4.2-3 重なりのあるベクトル集 合	135
§ 4.1-3 立入禁止地帯	121	§ 4.2-4 週期的に並んだ点集合	138
§ 4.1-4 実例	122	§ 4.2-4 問題	141
§ 4.1-5 強度を眺めて	125	§ 4.2-5 ベクトル集合の空間群	141
§ 4.1-5 問題	129	§ 4.2-6 Harker の切り口	142
4.2 Patterson 関数	130	§ 4.2-7 等価位置間のベクトル集	
§ 4.2-1 Patterson 級数	130		

合	144	§ 4.4-3 重原子法に残る困難	168
§ 4.2-7 問題	146	§ 4.4-4 軽原子決定の実例	170
§ 4.2-8 電子密度の Patterson 関 数	146	4.5 直接的な位相決定	171
§ 4.2-9 鋭くした Patterson 関数	148	§ 4.5-1 不等式法	172
§ 4.2-10 Patterson 関数の山の 高さ	148	§ 4.5-2 不等式法の応用の実例	173
§ 4.2-11 最小関数法	149	§ 4.5-3 符号の関係式	180
§ 4.2-12 Patterson 関数の解の 実例	152	§ 4.5-4 記号の和の方法(Symbolic Addition 法)	182
4.3 分子の形の利用	155	4.6 解きにくい構造	183
§ 4.3-1 分子内ベクトルの集合	155	§ 4.6-1 ホモメトリックな構造	183
§ 4.3-2 分子構造因子の利用	156	§ 4.6-2 右手と左手	185
§ 4.3-3 分子の位置の決定	159	§ 4.6-3 不完全な構造	187
§ 4.3-4 分子位置決定の実例	160	4.7 パラメーターの決定	188
4.4 部分から全体へ	162	§ 4.7-1 結晶構造を表現するパラ メーター	188
§ 4.4-1 重原子法と同型置換法	163	§ 4.7-2 パラメーターの正確な決定	189
§ 4.4-2 フーリエ合成と差の合成	164	§ 4.7-3 パラメーターの精度と有意 性	190

5 結晶構造解析の数学

5.1 変換の数学	191	変換	205
5.2 フーリエ変換の諸性質	194	§ 5.2-7 問題	207
§ 5.2-1 フーリエ変換の定義	194	§ 5.2-8 極座標によるフーリエ変 換	207
§ 5.2-2 フーリエ逆変換	195	§ 5.2-9 原子構造因子	208
§ 5.2-3 特別な関数のフーリエ変 換	195	§ 5.2-10 熱振動の影響	209
§ 5.2-3 問題	201	§ 5.2-11 フーリエ級数とフーリ エ成分	211
§ 5.2-4 関数の和のフーリエ変換	201	§ 5.2-11 問題	212
§ 5.2-5 週期関数のフーリエ変換	202	§ 5.2-12 フーリエ変換とフーリ エ級数との関係	214
§ 5.2-6 Convolution (たたみ込 み)	203	§ 5.2-13 フーリエ級数の微分	216
§ 5.2-7 Convolution のフーリエ 変換	205	§ 5.2-14 フーリエ級数の積分	218
5.3 線型変換の代数学	220		

§ 5.3-1	マトリックス演算	220	§ 5.4-3	熱振動テンソルの変換	238
§ 5.3-1	問題	224	§ 5.4-4	回転のマトリックス	239
§ 5.3-2	連立1次方程式	224	5.5	対称操作	239
§ 5.3-3	マトリックスの固有方程式	225	§ 5.5-1	対称操作のマトリックスによる表現	239
§ 5.3-4	長円体の主軸	226	§ 5.5-2	特殊位置	241
§ 5.3-5	最確値と標準偏差	227	§ 5.5-2	問題	242
§ 5.3-6	最小2乗法	229	§ 5.5-3	結晶構造因子の変換	242
§ 5.3-7	誤差の伝播	232	§ 5.5-3	問題	244
5.4	結晶格子の変換	233	5.6	強度の統計	244
§ 5.4-1	結晶軸の変換	233	§ 5.6-1	強度の分布	244
§ 5.4-2	基本テンソル	237	§ 5.6-2	対称中心の判別	245
§ 5.4-2	問題	238	§ 5.6-3	対称操作の影響	248

6 結晶構造解析の計算

6.1	電子計算機の利用	250	6.4	フーリエ合成	278
§ 6.1-1	計算機とプログラム	250	§ 6.4-1	フーリエ合成の一般式	278
§ 6.1-2	UNICS の基本的な考え方	252	§ 6.4-2	対称操作の取扱い	282
§ 6.1-3	三角関数の計算	255	§ 6.4-3	高い対称性の場合	286
§ 6.1-4	標準偏差の計算	256	§ 6.4-4	任意の切り口の計算	286
6.2	観測データの処理	257	§ 6.4-5	異常分散を含んだ場合	287
§ 6.2-1	データ処理の過程	257	§ 6.4-6	合成結果の表現	288
§ 6.2-2	フィルム因子と平均強度	258	§ 6.4-7	最小関数	292
§ 6.2-3	Lorentz, 偏光因子等の補正	258	6.5	パラメーターの関数	292
§ 6.2-4	吸収補正	260	§ 6.5-1	ベクトルの長さや方向	292
§ 6.2-5	相対尺度の決定	262	§ 6.5-2	原子間距離および角度の計算	293
§ 6.2-6	絶対尺度の決定	264	§ 6.5-3	テンソルの主軸	296
6.3	結晶構造因子と最小2乗法	265	§ 6.5-4	原子の非等方性熱振動	297
§ 6.3-1	結晶構造因子の計算	265	§ 6.5-5	分子の慣性エネルギーと最適平面	299
§ 6.3-2	最小2乗法	268	§ 6.5-6	分子の剛体振動	302
§ 6.3-3	特殊位置の原子	273	§ 6.5-7	熱振動による原子間距離の補正	304
§ 6.3-4	最小2乗法の適用条件	275			
	参考文献	306			

問題解答	308
付録Ⅰ 空間群決定の表	320
付録Ⅱ (a) 回転写真による回転軸週期決定の表	330
(b) ワイセンベルグカメラの目盛設定の表	335
付録Ⅲ 原子中心と Patterson 関数の中心の値の表	337
付録Ⅳ 5020 UNICS 使用法	344
1. プログラムカード	345
2. データーの構成	346
3. データーカード	346
4. 標準データー形式	348
5. 何もやらないサブルーティン (Dummy Subroutine)	355
6. プログラム使用法	355
RSLC-3 格子定数の決定	355
RSWS-3 対称中心判定	358
RDTR-3 反射データー処理	360
RSSFR-3 構造因子およびフーリエ合成	370
RSDLS-3 対角近似最小2乗法	378
RSSFA-3 結晶構造因子	378
RSFLS-4 完全マトリックス構造因子, 最小2乗法	382
RSDP-4 原子間距離および角度	387
RSBP-3 分子平面の計算	390
RSMV-4 分子の剛体振動	391
付録Ⅴ (a) ワイセンベルグフィルム上の極座標	巻末図
(b) ワイセンベルグフィルム上の逆格子座標	巻末図
索引	394