

目 次

1 X 線回折実験装置	[甲斐 泰].....	1
1・1 X 線 の 発 生		1
X 線発生の原理 (1) X 線管球 (3) 回転対陰極型		
X 線発生装置 (5) シンクロトロン放射光 (6)		
1・2 X 線の単色化とコリメーション		7
X 線の単色化 (7) 波高分析器 (8) β -フィルタ		
ー (9) バランスドフィルター (9) 単結晶モノク		
ロメーター (11) コリメーション (12)		
1・3 X 線 検 出 器		13
X 線フィルム (14) カウンター (15) 2 次元検出		
器 (15) イメージングプレート (16)		
1・4 X 線 の 防 護		17
X 線の人体への影響 (17) 回折実験における X 線の		
防御 (18) X 線の管理 (19)		
2 単結晶による X 線回折		21
2・1 構造解析をどのように進めるか	[大橋裕二].....	21
結晶による X 線の回折 (21) 結晶の対称性 (30)		
位相の求め方 (43) 解析の手順 (45)		
2・2 単結晶のつくり方	[宮前 博].....	47
単結晶生成法の分類 (47) 気相からの方法 (48)		

溶融相からの方法 (49)	溶液から析出させる方法 (52)	ゲルの利用 (56)	その他の問題 (56)	文献 (57)
2・3	4軸型回折装置	[田中清明]..... 57		
	4軸型回折装置の概要 (57)	4軸型回折装置の測定手順と4軸角度値の計算 (59)	κ 軸型4軸型回折装置 (63)	UB行列の決定 (64)
	4軸型回折装置の調整 (65)	UB行列を決めた後に注意すべきこと (72)	文献 (73)	
2・4	X線写真法	[今野美智子]..... 73		
	振動写真 (74)	ワイセンベルグ写真 (77)	プレセッション写真 (82)	
2・5	格子定数の決定と空間群の判定	[鳥海幸四郎]..... 86		
	単結晶X線回折実験の作業手順 (86)	単結晶試料の作成 (87)	風解性や潮解性のある結晶および化学的に不安定な結晶の取扱い (89)	回折X線のサーチと結晶の良否の判定 (90)
	単純格子の決定 (91)	晶系と空間格子の判定 (93)	反射強度の予備測定とラウエ対称の判定 (96)	消滅則と空間群 (98)
	結晶構造解析による空間群の決定 (101)	格子定数の決定 (103)	文献 (105)	
2・6	回折強度データの収集と補正	[大場 茂]..... 105		
	X線強度測定 (105)	強度補正 (111)	文献 (117)	
2・7	特殊条件下での回折実験	[鳥海幸四郎]..... 117		
	特殊条件下での回折実験の目的 (117)	原子の熱振動の温度依存性 (119)	窒素冷氣吹付け型低温装置 (120)	液体ヘリウムクライオスタット (124)
	結晶試料加熱装置 (125)	高圧X線回折実験 (125)	光照射下での構造解析 (127)	文献 (127)

3 結晶構造解析..... 129

3・1	近似構造の決定	[① 岩崎不二子 ② 小林昭子 ③ 内田 朗]..... 129
	直接法 (129) ^①	重原子法 (153) ^②
	ベクトルサーチ法 (164) ^③	文献 (172)
3・2	構造の精密化	[伊藤徹三]..... 174
	最小二乗法による構造の精密化 (175)	完全行列法とブロック対角法 (177)
	重みの与え方 (179)	特殊位置の扱い (180)
	原点の固定 (182)	水素原子の扱いとD合成 (182)
	異常散乱の扱い (184)	不規則構造などの扱い (185)
	束縛条件下の最小二乗法 (186)	文献 (187)
3・3	結果の評価	[伊藤徹三]..... 187
	解析結果の診断 (187)	原子配置 (189)
	温度因子 (192)	文献 (196)
3・4	絶対構造の決定	[黒田玲子]..... 196
	絶対構造の決定とは (196)	異常分散を利用する絶対構造決定の原理 (197)
	絶対構造決定の実例 (199)	絶対構造決定の実例 (202)
	文献 (206)	
3・5	電子密度と熱振動の解析	[田中清明]..... 206
	はじめに (206)	散乱因子の研究 (207)
	温度因子の研究 (209)	精密測定実験法および解析法の実例 (210)
	精密構造解析のためのプログラムシステム (215)	文献 (216)
3・6	結果のまとめ方	[伊藤徹三]..... 216
	結晶データ (217)	回折強度データの収集と補正 (219)
	解析法と精密化 (220)	解析結果の図および表 (222)
	文献 (225)	
3・7	データベースの利用	[竹中章郎]..... 225

構造情報 (225) データベースの種類 (226)
CSD システムの検索機能 (229) データベースの使
用例 (231) 文 献 (235)

4 生体高分子の構造解析237

4・1 解析のあらすじ[平山令明].....237
文 献 (239)

4・2 実 験 法[① 平山令明 ② 中川敦史].....239
結晶の調製 (239)^① 重原子導入法 (242)^① 回折
強度測定 (245)^② 文 献 (252)

4・3 解 析 法[田中信夫・北川康行].....253
重原子同形置換法 (253) 分子置換法 (260) 位
相角の決定と精密化 (262) 文 献 (263)

4・4 モデル作成
[① 中村和郎・栗原宏之 ② 田中信夫・北川康行].....264
ミニマップの作成 (264)^① ミニマップの解釈 (265)^①
グラフィックスプログラムによるモデルの作成 (267)^①
電子密度図をきれいにする方法 (268)^② 文 献
(270)

4・5 構造の精密化[田中信夫・北川康行・平山令明].....271
PROLSQ による精密化 (271) X-PLOR (273)
分解能の拡大 (275) 文 献 (275)

4・6 結果の整理と事例[平山令明・田中信夫・北川康行].....275
解析の限界, 信頼度および精度 (275) 解析結果の表
現 (277) タンパク質の構造研究のためのソフトウ
ェア (280) 実 例 (281) 文 献 (284)

5 X 線粉末回折法[虎谷秀穂].....287

5・1 粉末回折法の原理287

はじめに (287) 粉末回折法の原理 (288) 解析
の手順 (290)

5・2 粉末回折装置291
粉末回折計 (291) 放射光と平行ビーム法 (297)
エネルギー分散型および PSPC/PSD (300) カメラ
法 (301) 文 献 (305)

5・3 実 験 法305
試料の作成 (305) 強度データの測定 (307) 特
殊条件下での測定 (309) 文 献 (309)

5・4 パターンフィッティング法309
プロファイル強度計算 (310) プロファイルフィッテ
ィング法 (313) Pawley 法 (315) Rietveld 法
(317) 最小二乗法と R 因子 (317) 文 献
(318)

5・5 格子定数および空間群決定319
格子決定 (319) 空間群の決定 (320) 格子定数
の精密測定 (320) 試料成分のチェック (324)
文 献 (325)

5・6 結晶構造解析325
未知結晶構造の決定 (325) 構造の精密化 (326)
おわりに (332) 文 献 (332)

6 非晶質 X 線回折335

6・1 非晶質 X 線回折の原理と手順[早稲田嘉夫].....335
はじめに (335) 非晶質系における原子分布の記述
(335) 非晶質系の構造解析の基本原則 (337) 非
晶質系の X 線回折実験の基本的手順 (339) 文 献
(347)

6・2 融体およびガラス[早稲田嘉夫].....347
金属・合金の融体およびガラス構造の解析例 (347)

酸化物融体およびガラス構造の解析例 (352)	X 線異常 (共鳴) 散乱法の利用 (359)	今後の課題 (369)	文 献 (370)
6・3 液体と溶液	[西川恵子].....371		
はじめに (371)	角度分散法による実験と解析 (372)	エネルギー分散法による実験と解析 (375)	液体や溶液からの X 線散乱強度とフーリエ変換 (383)
液体の構造モデルとシミュレーション (388)	解析例 (391)	文 献 (391)	
6・4 気 体	[西川恵子].....392		
はじめに (392)	実験と解析 (393)	文 献 (396)	
7 X 線小角散乱	397		
7・1 X 線小角散乱法の生体試料への応用	[植木龍夫].....397		
X 線小角散乱の基礎 (397)	小角散乱装置 (399)	試料槽 (405)	データ処理について (406)
生体高分子試料への応用の例 (406)	文 献 (409)		
7・2 非晶質系 (液体およびガラス)	[早稲田嘉夫].....410		
X 線小角散乱法による非晶質系の構造解析の主目的 (410)	X 線小角散乱法による非晶質系の解析例 (412)	X 線異常散乱法の利用 (419)	文 献 (419)
7・3 低分子溶液とゆらぎ	[西川恵子].....420		
低分子溶液の小角散乱実験の目的 (420)	基本的原理および理論 (421)	実験上の特殊問題 (425)	解析例 (430)
文 献 (431)			

8 電 子 回 折	433
8・1 固体からの電子回折	[高柳邦夫].....433
電子回折図形の観察 (433)	固体からの電子回折の特徴と解析手順 (436)
透過電子回折の波動力学 (445)	固体 1 次構造解析への応用 (451)
まとめ (457)	文 献 (457)
8・2 気体電子回折	[小中重弘・江川 徹].....458
はじめに (458)	基本原理 (458)
実験方法 (461)	写真装置と実験操作 (465)
直接測定装置と実験操作 (471)	分子の構造解析 (473)
分子内電子分布の研究 (478)	文 献 (479)
9 中 性 子 回 折	[新村信雄].....481
9・1 概 要	481
回折結晶学における中性子回折の位置づけ (481)	中性子と物質との相互作用 (482)
中性子回折の特徴 (486)	
9・2 中 性 子 源	486
放射性同位元素 (RI) を用いた中性子源 (486)	原子炉 (487)
加速器 (488)	冷中性子源とガイド管 (490)
文 献 (492)	
9・3 測定装置と実験法	492
中性子の検出 (492)	定常中性子による実験 (497)
パルス中性子による実験 (499)	中性子小角散乱法 (508)
文 献 (513)	
9・4 測定結果の解析	514
Rietveld 法 (514)	ダイナミックマスク法 (515)
各種補正について (517)	文 献 (522)
9・5 凝集体の構造研究	522

結晶構造解析 (522)	液体による散乱 (526)	磁
性体による散乱 (528)	生体物質による散乱 (531)	
非弾性散乱 (535)	文 献 (537)	
9・6 中性子回折実験を行うための諸手続き	538	
付 録	[平山令明・関根あき子] 549	
主な市販機器のリスト	(549)	
索 引	551	

[] 内氏名は執筆担当者