

まえがき

本書は、X線構造解析を理解するための本である。X線構造解析の主要な基礎にフーリエ展開と空間群についての理論があり、多くの化学者にとっては、これらを乗り越えるのが難しい。このため、基礎部分は、とりあえず、こういうものだと詰め込み、実際に構造解析を体験して中身を理解する人が多いと思う。最初に学んだときには、なぜだろうという疑問がたくさん出てくるのだが、実際に構造解析に携わり、試行錯誤しているうちに、こういうものかと理屈抜きでわかってきて、疑問も感じなくなってくる。

もし、最初の段階から、もう一段深い部分まで、わかりやすい解説に触れることができれば、見通しよくX線構造解析が学べるのではないかと、というのが、本書のねらいである。この「もう一段深く」というところがなかなか難しく、細かな内容に落ち込んだ部分や、逆に粗すぎる部分もあると思われる。読者は、適宜取捨選択して読んでいただきたい。

X線構造解析の基礎理論を理解したからといって、構造解析を直ちに実行できるわけではない。そのためには、多くの実際的な知識が必要である。幸い、X線構造解析についてのよい指導書がすでに多く出版されているので、本書は、あくまでも理解の部分、基礎の部分に重点を置いた。ただし、無機結晶では大きな問題となりがちな事項については、少し突っ込んだ解説を行った。

本書は、大きく分けて2つに分かれている。最初の3章は、X線回折の理論である。第1章はX線回折現象全体の把握を目指したので、後の章と重なる部分がある。第2章は、回折条件の説明で、周期的な構造と波数空間（逆格子空間）の関係が最も重要なテーマ

である。第3章は、フーリエ変換を使って構造因子の式の意味を理解することを目標としたため、数式がやや多くなっている。第4章は、結晶構造の対称性についての解説である。多くの教科書では記載が表面的な部分であり、構造解析以外にも役に立つかもしれない。

私自身は、無機合成の分野の人間で、構造解析の専門家ではない。大学院生のときにX線構造解析全般にわたる授業を受講して一通りのことを学び、ポストク時代から自分で構造解析を経験した。その後、新しい精密化のプログラムを作ったりして、少しずつ、X線構造解析について学んできた。その時々で必要な知識を身につけてきたため、体系的な理解に欠ける部分があり、今回、本書を書くにあたって、学び直し、考え直し、間違いのないように努力したが、不正確な部分が残っているかもしれない。なお、用語は、できるだけ *International Tables for Crystallography* に従うようにしたので、日本の慣用的な用語からずれている部分がある。

X線構造解析の基礎の部分は、内容量が多く、また、いろいろな事項が互いに関係していて、理解しにくい部分が多い。これから構造解析を学ぼうとする人が、本書を読んで、「ああ、そういうことか!」と思うところがあれば、というのが、私の願いである。

約40年前、急遽、X線構造解析を身につけることが必要となったとき、小林昭子先生に手ほどきをうけ、その後も、X線測定・構造解析について多くのことを教えていただいた。心から感謝いたします。また、編集委員の岩澤康裕先生には、細かな点から大きな方向性まで、貴重なご意見をいただき、本書を今の形に完成することができた。ここに感謝申し上げます。

2016年5月

井本英夫