

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	ブラベーブロック	140
4.5.1	単純格子と複合格子	140
4.5.2	ブラベーブロック	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