

---

## 1 散乱・回折の基礎

---

1.1 散乱と回折を表記する基本パラメータ .....	1
1.2 X線, 電子線, 中性子線 .....	4

---

## 2 X線の発生と検出

---

2.1 X線の発生法 .....	7
2.1.1 はじめに .....	7
2.1.2 X線発生装置 .....	7
2.1.3 シンクロトロン放射 .....	13
2.1.4 新しいX線光源 .....	17
2.2 X線検出器 .....	18
2.2.1 はじめに .....	18
2.2.2 光子計数型検出器 .....	20
2.2.3 種々の光子計数型X線検出器 .....	25
2.2.4 写真フィルム .....	32
2.2.5 イメージングプレート .....	32
2.2.6 半導体イメージセンサ .....	36

---

## 3 単結晶によるX線回折

---

3.1 構造解析をどのように進めるか .....	39
--------------------------	----

4.5	パターン分解	200
4.5.1	個別プロファイルフィッティング	200
4.5.2	全回折パターンフィッティングの特徴	201
4.5.3	Pawley 法	202
4.5.4	Le Bail 法	204
4.5.5	部分構造を導入した Le Bail 解析	207
4.5.6	全回折パターンフィッティングの用途と弱点	207
4.6	最大エントロピー法による電子・原子核密度の決定	208
4.6.1	MEM の原理	208
4.6.2	MEM の特徴	210
4.6.3	MEM 解析用ソフトウェア	211
4.6.4	回折データに MEM を適用する際の注意点	212
4.6.5	MEM による構造精密化の手順	213
4.6.6	第一近似にもとづく電子・原子核密度のイメージング —MEM/リートベルト法—	214
4.6.7	MEM-w.p.f. の反復による密度分布の最適化—MPF 法—	216
4.7	非経験的構造解析	217
4.7.1	非経験的構造解析の概要	217
4.7.2	パターン関数の利用によるパターン分解の高度化	220
4.7.3	粉末回折専用直接法プログラム SIRPOW	223
4.7.4	モンテカルロ法	224
4.7.5	シミュレーティッドアニーリング	225
4.7.6	遺伝的アルゴリズム法	226

## 5 生体高分子の結晶構造

5.1	構造解析をどのように進めるか	231
5.2	結晶化と X 線回折実験	234
5.2.1	結晶化法	234
5.2.2	位相決定のための結晶調製	241
5.2.3	回折強度測定	246
5.3	構造解析(位相決定)法	252
5.3.1	重原子同形置換法	253
5.3.2	多波長異常分散法(MAD 法)	256
5.3.3	分子置換法	258

5.3.4	位相の精密化(重原子パラメータの精密化)	260
5.4	分子モデルの構築	260
5.4.1	初期位相の改良	261
5.4.2	位相改良の実際	265
5.4.3	電子密度の解釈とモデルの構築	266
5.5	結晶構造の精密化	267
5.5.1	精密化の原理と方法	268
5.5.2	精密化のプログラム	270
5.6	構造の解釈	273
5.6.1	モデルの正しさと解析の精度	273
5.6.2	構造の表現	275
5.6.3	類似構造の検索	277

## 6 非晶質の構造

6.1	液体・溶液からの散乱と動径分布関数	279
6.1.1	はじめに	279
6.1.2	非晶質物質の散乱パターン	279
6.1.3	二体分布関数と動径分布関数	281
6.1.4	非晶質物質の X 線回折実験の概観	283
6.1.5	角度分散法による X 線回折実験と解析 —イメージングプレートを検出器とした場合—	286
6.1.6	エネルギー分散法による X 線回折実験と解析	289
6.1.7	フーリエ変換と動径分布関数	293
6.2	X 線異常散乱	297
6.2.1	はじめに	297
6.2.2	X 線異常散乱の原理	299
6.2.3	X 線異常散乱実験の概要	300
6.2.4	X 線異常散乱を用いた構造解析への応用例	303
6.2.5	今後の課題	309

## 7 メゾスケールの構造(小角散乱)

7.1	X 線小角散乱装置	311
-----	-----------	-----

7.1.1	小角散乱装置の概要	311
7.1.2	非収束カメラと光学系	312
7.1.3	収束光学系と収束素子	316
7.1.4	小角・中角散乱測定用収束カメラ	319
7.1.5	その他のおもなコンポーネント	320
7.1.6	シンクロトロン放射光を利用した小角散乱装置	322
7.2	小角散乱の一般論	323
7.2.1	小角散乱の基礎概念	324
7.2.2	球状粒子からの散乱	326
7.2.3	大きさの決定—Guinier の解析—	327
7.2.4	各形状の粒子散乱因子	328
7.2.5	異方性粒子の解析	328
7.2.6	相互作用系, 高次構造	330
7.2.7	コロイド会合体と質量フラクタル	333
7.2.8	界面構造	333
7.2.9	SANS の特徴とコントラスト変化法	334
7.3	高分子, コロイド, ミセルへの応用	338
7.3.1	高分子溶液	338
7.3.2	高分子薄膜, 繊維	341
7.3.3	ミセル溶液	342
7.3.4	コロイド分散液	343
7.4	生体高分子の X 線回折—円筒対称パターン関数—	345
7.4.1	はじめに	345
7.4.2	円筒対称パターン関数	346
7.4.3	$Q(r, z)$ の応用	351
7.4.4	$\Delta Q(r, z)$ の応用	353
7.4.5	らせん生体高分子の X 線回折強度	358
7.5	ゆらぎと小角散乱	360
7.5.1	はじめに	360
7.5.2	分子分布の不均一度—密度ゆらぎ—	361
7.5.3	溶液の混ざり具合—濃度ゆらぎ—	365
7.5.4	Kirkwood-Buff のパラメータ	368
7.5.5	実験上の留意点と解析例	369

---

## 8 中性子散乱

---

8.1 中性子の発生と性質 .....	373
8.1.1 原子炉からの中性子 .....	373
8.1.2 加速器を使用したパルス中性子 .....	378
8.1.3 中性子散乱に必要な原理と物理定数 .....	380
8.1.4 中性子の散乱振幅と散乱断面積 .....	382
8.1.5 中性子の実験を行いたい人のために .....	386
8.2 単結晶中性子回折による結晶構造解析 .....	387
8.2.1 必要な結晶の大きさと水素の問題 .....	388
8.2.2 中性子4軸回折装置の特徴 .....	390
8.2.3 構造解析の例 .....	392
8.3 磁気構造の決定 .....	402
8.3.1 磁気構造の種類 .....	402
8.3.2 中性子磁気散乱の構造因子 .....	405
8.3.3 磁気構造と反射の関係 .....	410
8.3.4 実際の実験例—希土類化合物 $TmB_2C_2$ を例として— .....	411

---

## 9 表面・薄膜構造

---

9.1 電子回折 .....	421
9.1.1 はじめに .....	421
9.1.2 逆格子と電子回折図形 .....	423
9.1.3 運動学回折理論 .....	430
9.1.4 動力学回折理論 .....	435
9.1.5 収束電子回折(CBED)法 .....	445
9.2 電子顕微鏡 .....	452
9.2.1 はじめに .....	452
9.2.2 TEM の基本構成 .....	453
9.2.3 TEM 観察の基本原則 .....	454
9.2.4 結晶構造像の基本原則 .....	458
9.2.5 結晶構造像撮影の具体的手順 .....	462
9.2.6 結晶構造像撮影のポイントとノウハウ .....	463
9.2.7 TEM 観察のための試料研磨手法 .....	465

9.2.8 最近の新技术	469
9.2.9 おわりに	471

---

## 10 特殊実験

---

10.1 微小結晶構造解析	473
10.1.1 はじめに	473
10.1.2 白色ラウエ法	474
10.1.3 構造精密化の手順	475
10.1.4 今後の展開	476
10.2 表面 X 線回折	477
10.2.1 はじめに	477
10.2.2 表面構造の表記法	477
10.2.3 表面 X 線回折法	478
10.2.4 おわりに	483
索引	485