

6 基礎技術 5 構造解析

- 1 結晶の形態と光学的性質 (I) [1II 6, 17 10・2]
 - 1・1 結晶の対称性とその外的出現 (I) [19II 11・3・1]
 - まえがき (I)
 - 対称操作と対称の要素 (2)
 - 点群とその表示方法 (4)
 - 結晶の外形とその測定 (7)
 - 結晶の性質と対称性 (13)
 - 1・2 結晶の光学的性質 (17) [1I 2・4・2, 19II 11・3・3, 19II 11・4]
 - 結晶の光学的性質 (17)
 - 光学顕微鏡による観察と測定 (20) [1I 2・4・1, 13II 6・1・4]
- 2 回折理論と結晶の対称 (27) [1II 6, 13II 6, 17 7・1, 17 9, 17 10・2]
 - 2・1 結晶格子 (27)
 - 空間格子と単位胞 (27)
 - 格子面と晶帯 (28)
 - 格子の乱れ (29)
 - 2・2 結晶によるX線回折の理論 (30) [9II 8・4, 19II 11・2・2, 19II 11・3・5]
 - X線の基本的性質 (30) [18 1・1・1]
 - 散乱因子と散乱ベクトル (32)
 - 原子散乱因子 (33)
 - 結晶によるX線の回折 (36)
 - 構造因子の表現 (I) (40)
 - 積分反射強度 (41)
- 3 単結晶によるX線回折の実験 (77) [1II 6, 13II 6, 17 7・1, 17 9, 17 10・2]
 - 3・1 X線の発生 (77) [9II 8・4]
 - X線発生装置 (77)
 - 特殊X線発生装置 (80)
 - X線の単色化 (81)
 - X線のコリメーション (84)
 - 3・2 X線回折写真 (84) [1II 7・5]
 - 試料の取付け (84)
 - 振動写真 (85)
 - ワイセンベルグ写真 (88)
 - プリセッション写真 (93)
 - 3・3 回折写真から回折強度を求める方法 (96) [19II 11・2・1]
 - 結晶の乱れと散漫散乱 (45)
- 2・3 結晶構造の対称 (46)
 - 結晶構造の対称要素 (47)
 - 結晶の属する点群と単位胞の選択 (50)
 - 空間群 (53)
 - 結晶学的同価位置と非対称単位 (58)
- 2・4 逆空間の対称と空間群の判定 (60)
 - 構造因子の表現 (II) (60)
 - フリーデルの法則 (61)
 - 点群による等価反射 (62)
 - 回折の対称と空間群の判定 (65)
 - 異常分散の影響 (70)
 - 結晶の対称と強度の統計 (72)

- はじめに (96)
- 目測による強度測定 (98)
- マイクロデントメーターの利用 (99)
- 回折強度の補正 (99)
- 3.4 単結晶X線回折計 (101)
- はじめに (101)
- 計数管 (102) [7I1・3・2, 7I1・3・4, 7I2・1]
- 四軸型回折計 (102)
- 3.5 特殊条件下での回折実験 (108)
- 低温でのX線回折実験 (108)
- [1I2・2・3]
- 高温でのX線回折実験 (109)
- 3.6 格子定数の求め方 (110)
- [19II11・2・1]
- 格子定数の決定 (110)
- 格子定数の精密化 (111)
- 3.7 半導体検出器とその利用 (113)
- [7I1・3・3, 7I2・1, 9II8・4]
- 半導体検出器の特徴 (113)
- SSD 回折計 (115)
- SSD 回折計の応用分野 (117)
- 3.8 熱散漫散乱 (118)
- 4 X線結晶解析 (121) [1II6, 210・4・8, 13II6, 177・1, 179, 1710・2, 185・3・2, 186・3・4]
- 4.1 どのようにして結晶構造を決めるか (121) [19II11・1]
- 結晶解析の目標 (121)
- 結晶解析の基本的考え方 (123)
- 結晶解析の実際 (130) [1I2・1・2]
- 結晶解析の結果 (134)
- 4.2 フーリエ級数法の利用 (138)
- はじめに (138)
- フーリエ級数法の理論 (139)
- パターン関数法 (143)
- フーリエ級数の求和の計算法の実際 (148)
- フーリエ合成の計算結果の表現法 (151)
- 4.3 直接法 (153)
- はじめに (153)
- 直接法の原理 (155)
- 原点の指定 (168)
- 直接法の使い方 (179)
- 4.4 原子パラメーターの精密化と精度 (198) [1II8・4]
- はじめに (198)
- 最小二乗法による非線形関数の最適化 (198)
- パラメーターの最確値と標準偏差 (199)
- パラメーターと微分係数 (202)
- 逆行列の計算 (204)
- 精密化の技法と注意 (206)
- パラメーターの追加と精密化の終点 (214)
- 誤差の診断 (217)
- 精密化における系統誤差の影響 (220)
- 分子パラメーターの計算と結果の検定 (221)
- 熱振動の影響 (228)
- 4.5 電子密度分布 (232)
- 差の電子密度 (232)
- 測定, 解析上の問題点 (234)
- 結果の整理 (237)
- 4.6 絶対構造の決定 (238)
- 異常分散を応用する絶対構造決定の原理 (238)
- 絶対構造決定の実際 (240)
- 4.7 散漫散乱 (245) [19II11・2・2,

19II 11・3・5]

格子振動 (246)

格子不整による散漫散乱 (248)

4・8 いろいろな失敗について (251)

単位胞を誤った例 (251)

結晶系を誤った例 (252)

空間群を誤った例 (252)

反射数の不足 (253)

分子配向の乱れ (254)

最小二乗法による精密化 (255)

5 生体高分子結晶の構造解析 (257)

[1II 6, 13II 6, 177・1, 1710・2]

5・1 解析のあらすじ (258)

タンパク質, 核酸の単結晶の特徴
(258)

多重重原子同形置換法の原理 (259)

解析のあらすじ (260)

5・2 実験法 (260)

結晶の調製 (260)

重原子導入法 (262)

回折強度測定 (265)

フローセル法 (270)

5・3 解析法 (271)

重原子位置決定 (271)

位相角決定と電子密度図作製 (277)

同形置換法以外の方法 (283)

5・4 モデル作製 (285)

立体モデル作製 (285)

精密化と分解能の拡張 (287)

5・5 基質の結合と化学修飾 (290)

5・6 解析の限界, 信頼度, 精度 (292)

5・7 二, 三の解析例 (294)

チトクローム c (294)

リボスクレアーゼ (297)

ホスホグリセリキナーゼ (299)

トリプシンインヒビター (300)

tRNA (301)

6 中性子回折 (305) [1II 6, 177・1,
1710・2, 19II 11・5・3]

6・1 中性子線の散乱の特徴 (305)

[7I 1・2・5]

はしがき (305)

中性子線 (306)

中性子線の吸収と散乱 (306)

原子による散乱 (307)

結晶による回折 (310)

6・2 中性子回折の装置と実験法 (311)

[7I 1・1・4, 7I 1・3・4, 7I 2・1]

中性子線の線源 (311)

中性子回折の方法 (312)

中性子回折装置 (313)

回折実験法 (315)

測定強度の補正 (319)

6・3 中性子回折の応用と実際 (321)

構造解析の実例 (321)

X線を併用した構造解析 (324)

TOF法の応用例 (326)

構造解析の将来展望 (326)

7 電子顕微鏡と電子線回折 (331) [1II 6,
177・1, 1710・2, 184・2, 185・3・1]

7・1 電子線の性質 (331)

電子線の波長 (331)

電子の原子散乱因子 (332) [7I 1・2・2]

7・2 電子線回折の特徴 (334)

電子線回折の逆格子による解釈 (334)

電子線の回折強度 (338)

7・3 透過型電子顕微鏡の構成と機能
(342) [19II 11・3・1]

電子顕微鏡の構成 (342) [29]

- 電子レンズと収差 (344)
- 電子レンズによる結像と機能 (347)
- 電子顕微鏡の分解能 (I) (351)
- 7.4 試料作成法と観測 (352)
- [19II 11.3.1]
- 試料用支持膜 (352)
- 薄片結晶試料作成法 (354)
- 電子顕微鏡の倍率校正法 (356)
- 7.5 電子顕微鏡における電子線回折 (357)
- 試料の構成と電子線回折像 (358)
- 物質の同定, 面間距離, 格子定数の測定 (361)
- 結晶の配向と晶癖 (364)
- 結晶構造の解析 (365)
- 7.6 電子顕微鏡像のコントラスト (368)
- 等傾角干渉図形 (368)
- 転位のコントラスト (371)
- 等厚干渉縞 (372)
- 7.7 高分解能電子顕微鏡像 (374)
- 電子顕微鏡の分解能 (II) (374)
- 格子像の形成 (376)
- 格子像による結晶の微細構造の研究例 (380)
- 単位胞内の構造と分子像の観察 (384)
- 電子顕微鏡の特性と分子像の分解能 (386)
- 分子像の再合成と構造因子の位相の保存性 (391)
- 電子線損傷 (394)
- 7.8 走査型電子顕微鏡 (395)
- SEM の原理および構造 (395)
- SEM 像の形成 (397)
- SEM の性能 (399)
- 試料の調製 (400)
- 結晶性試料の観察 (401)
- 透過型走査電子顕微鏡 (403)
- 7.9 気体電子線回折 (408) [17.1.1]
- 8 質量スペクトル (409) [9II 12, 104.6.1, 112.1.1, 1315, 174.2, 175.2]
- 8.1 質量スペクトルと装置 (409)
- 質量分析装置と質量スペクトルの例 (409)
- 質量スペクトルの特質 (413)
- 装置 (415)
- 装置の種類, 特論 (418) [175.4]
- 8.2 理論 (424)
- 準平衡理論 (424)
- 分子軌道理論 (430)
- 8.3 イオン化電圧および出現電圧 (435)
- 実験上の一般的な注意 (436)
- 電子衝撃法による IP, AP の測定 (437)
- フラグメントイオンの運動エネルギーを考慮した AP の測定 (449)
- 光イオン化法による IP, AP の測定 (450)
- 8.4 負イオンの測定 (454)
- 磁場単収束型質量分析計による負イオン測定法 (454)
- 電子衝撃による負イオン生成 (456)
- 負イオン・質量スペクトル (457)
- 負イオンを測定するときの注意事項 (458)
- 8.5 運動エネルギーをもつイオンのスペクトル (461)
- メタステーブルイオンの利用 IKE スペクトル (461)
- KE 質量スペクトル (465)
- 8.6 固体質量分析 (469)

- はじめに (469)
 イオン化方式と質量分析装置 (470)
 分析操作および解析法 (472)
 電気検出法 (478)
 乾板検出法と電気検出法の比較 (479)
 固体質量分析法の特徴と問題点 (480)
- 8.7 イオンマイクロアナライザー (481)
 スパッタリング現象の概略 (481)
 装置の概要 (483)
 IMA から得られる情報 (485)
 定量分析法 (486)
- 9 電子分光法 (489) [9 II 11, 165.2, 184.2]
- 9.1 序論 (489)
- 9.2 電子分光実験法 (493)
 電子分光実験装置の構成 (493)
 電子エネルギー分析器と電子レンズ (493)
 電子の検出とスペクトルの記録 (505)
 外部磁場の打消し, シャヘいと分光器材料の消磁 (508)
 真空排気系 (509) [112.3.1~2.3.2, 29]
 試料処理と導入 (510)
- 9.3 紫外光電子分光法 (511) [4 I 3.1, 53.3]
 紫外光電子分光の実験方法 (511)
 光電子スペクトルの解釈と応用 (514)
- 9.4 X線光電子分光法 (533) [103.2]
 X線光電子分光の実験方法 (533)
 X線光電子スペクトルの解釈 (538)
- 9.5 電子衝撃分光法 (545) [7 II 7.1.3]
 はじめに (545)
 電子衝撃分光の実験方法 (545)
 電子衝撃スペクトルの解釈 (549)
- 9.6 オージェ電子分光法 (553)
 オージェ電子分光の実験方法 (553)
 オージェ電子スペクトルの解釈 (554)
- 9.7 ベニングイオン化電子分光法 (561)
 はじめに (561)
 ベニングイオン化電子分光の実験方法 (562)
 ベニングイオン化電子スペクトルの解釈 (563)
- 9.8 その他の電子分光法 (565)
 はじめに (565)
 イオン中性化電子分光法 (566)
 重粒子衝撃電子分光法 (569)
 化学電子分光法 (570)