まえがき

結晶学は古くから発展してきた学問で，鉄や半導体が産業の基盤と同じように，固体物理，材料科学，無機有機化学，構造生物学など，様々な学問の基礎となるものです．ブラッグ親子が最初に NaCl やダイヤモンドなどの簡単な物質の構造を決めて以来，構造解析でたくさんのノーベル賞受賞者が出ています．日本では，例えば「X 線結晶学」という本で有名な仁田勇はふぐ毒の構造解明で文化勲章を受けています．現在では，ウィルス全体の構造解析までできる時代です．

ところが，結晶学の授業がまともに行われている大学はほとんどありません．ある時期，大学から構造解析を専門に行う物理の分野が消えてしまいました．ちょうどその頃，高温超伝導体発見の騒ぎが起こります (1986 年)．発見者のミュラー (Karl Alexander Müller) はもともと強誘電体の研究者で，電気を通さない強誘電体の近くに超伝導が起こりうると信じて研究を行い，新しい超伝導体の発見につながりました．日本にもすぐにこの高温超伝導フィーバーは飛び火しましたが，このとき，日本では合成した物質の構造を決めることができる研究室はほとんど残っていませんでした．そのとき活躍したのが，つくば市にあった当時の無機材質研究所 (NIRIM) と高エネルギー加速器研究所の中性子施設 (KENS) でした．今から見れば非力なパルス中性子を使って結晶構造を解明し，構造研究の重要性を世に知らしめました．それ以降，新しい高温超伝導体の論文には構造のデータも必要となりました．

構造物性という言葉が 1980 年代後半頃から使われ出しました．この言葉は，構造生物学という言葉が使われたのに伴いあちこちで使われ始めたのですが，そもそもは「物の性質=物性」は構造と密接に関係しているという認識から，結晶構造と物性の関係を詳しく調べる学問分野です．構造解析は今では誰でもやっています．その実験手法の中心は X 線粉末回折とリートベルト法の組み合わせです．論文を査読すると時々とんでもないことを書いているのに驚かされます．ほんの少し結晶学の知識があればそのような間違いは起こさないのですが，コンピュータが打ち出した結果は「神の声」のように，そのまま信じて論文にす

る人が多数います．1800 年代には結晶学の基本的なところは完成しているので，使っている数学は簡単なものです．しかしながら，きっちりと教育しない状態が続いていくと先生も学生もコンピュータのブラックボックスだけに頼って研究するという困った状態になっていきます．結晶学のような古い学問はもう必要ないと公言する偉い先生もいます．しかしながら，現在でも多くの新しい実験装置や解析方法あるいは方法論が考え出されている源は基礎となっている結晶学であり，ユーザーがリートベルト法などの便利なプログラムの恩恵にあずかっているのも，このような基礎的なことを十分に理解した結晶学者達のおかげなのです．

本書の基本的なところは，1990 年から 8 年間千葉大学理学部物理の 2 年生の講義として使用した講義ノートを元にしています．物理の学生だけでなく地学や化学の学生も参加可能な授業でしたので，物理寄りの記述になっていますが，化学や生物の学生にとってもそれほど難しくないと思っています．大学院の授業で行った相転移論の入門的なところも少し取り込んでいます．また，これらの一部分は 1999 年から 4 年間東北大学理学部物理の 4 年生の授業としても行い，あちこちの大学での集中講義でも使用しました．今回，教科書にまとめてみると，装置の大きな進展により，今日的な問題を多数加筆する必要も生じてきました．そこで，最新の装置を利用するときに戸惑わないように，原理的なところを色々と付け加えています．本書の第 2 章から 5 章までは結晶学の基礎となるところ，第 6 章から 8 章までは X 線や中性子回折実験の基礎と応用，第 9 章では構造相転移，第 10 章では結晶・磁気構造解析の実例の話を書いています．結晶学は一見取っつきにくそうですが，とても簡単です．学生だけでなく，耳学問で構造解析を行っている一線の研究者にも大変役に立つ内容が多数書かれています．そのような意味で，この教科書は結晶学に初めて接する学生の入門コースとしてだけでなく，専門家と言っている人々にとっても新しい切り口の入門コースになっているのではないかと思います．他の本を参考にしなくてもこの本だけで分かるように書きましたので，ぜひ基礎からきっちりと勉強してください．この本がそのような方々の役に立つのなら大変光栄です．

2016 年 10 月

野田 幸男