

JKA補助事業 基礎セミナー 第1回

単結晶 X 線構造解析の基礎 - 初心者のための基礎セミナー -

単結晶X線構造解析は、結晶中での立体構造のみならず、光学活性体の絶対配置や結晶溶媒・塩の状態、分子内・分子間相互作用など様々な情報を得ることができる、きわめて強力な分析法です。最近では、X線回折装置や結晶解析プログラムの性能向上に伴って、結晶学を専門としない研究者にとっても汎用的な分析手段となってきました。

本セミナーでは、結晶学に関するウェブサイトやソフトウェアの開発も手掛けられている、大阪公立大学の瀬戸雄介氏を講師に迎え、単結晶構造解析の基礎理論を中心に講演いただきます。結晶学は独学で学びづらい分野でもあります。これまで結晶学との接点がなかった方、改めてしっかり理解したいと感じている方、これから業務で単結晶構造解析を活用したい方など、この機会に是非ご参加ください。

講演タイトル

参加
無料

1. X 線の散乱と回折
2. 対称性と空間群の考え方
3. 結晶構造解析の流れ

大阪公立大学大学院 理学研究科 瀬戸 雄介 准教授

2025年10月1日(水) 10:00~16:10
(9:30より受付開始)

- ・開催場所：地方独立行政法人大阪産業技術研究所 森之宮センター 4階 小講堂
- ・参加費：無料
- ・定員：40名（先着順）
- ・申込方法：下記URL（ホームページ）または

右記二次元バーコードよりお申し込みください。

<https://orist.jp/>

大阪技術研

検索



開会挨拶

10:00~10:10

大阪産業技術研究所 電子材料研究部 部長 小林靖之

セミナー概要

講師:大阪公立大学大学院 理学研究科 准教授 瀬戸雄介

1.X線の散乱と回折

10:10~11:40

X線は可視光よりはるかに短い波長をもち、物質を構成する原子(の軌道電子)によって散乱されます。結晶にX線を照射すると、規則正しく並んだ原子から散乱するX線は干渉し特定の方向に強め合う「回折」という現象が生じます。

本セミナーでは、単結晶X線構造解析の基礎となるX線の性質や結晶による回折条件について説明します。

2.対称性と空間群の考え方

13:00~14:30

対称性とはなんらかの操作を施しても元の状態と区別できない性質のことで、その操作を対称操作といいます。結晶は並進(平行移動)の対称操作を有し、その並進の距離と方向で単位格子が定義されます。結晶は、平行移動以外にも回転、鏡映、らせんなどの様々な対称操作を含んでおり、これらの操作の組み合わせは空間群という概念で説明されます。空間群を理解することは、X線構造解析の結果を解釈するうえで重要です。

本セミナーでは、対称性と空間群の基礎的な理解を深めます。

3.結晶構造解析の流れ

14:40~16:10

X線構造解析とは、X線回折装置によって回折強度と回折角度を測定し、得られたデータを説明しうる結晶構造モデルを構築および最適化する作業です。構造モデルは、まず単位格子と空間群を判定し、空間群の対称性に従って単位格子内に原子を配置することで構築します。さらに原子位置を少しずつ変化させ、最も観測強度と一致する原子位置を求めることで構造を最適化します。

本セミナーではX線回折測定の流れと測定によって得られたデータの解釈について説明します。

【お問い合わせ】

地方独立行政法人大阪産業技術研究所 企画部（辻谷、尾崎）

〒536-8553 大阪市城東区森之宮1丁目6番50号

TEL : 06-6963-8331、E-mail : event@orist.jp