

Title	楕円体近似による分子性結晶の構造決定
Author(s)	高木, 義人
Citation	
Issue Date	
Text Version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/11094/28659">http://hdl.handle.net/11094/28659</a>
DOI	
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

## 【24】

氏名・(本籍)	高	木	義	人
	たか	き	よし	と
学位の種類	理	学	博	士
学位記番号	第	435	号	
学位授与の日付	昭	和	38	年
	6	月	22	日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当			
学位論文題目	楕円体近似による分子性結晶の構造決定			
	(主 査)		(副 査)	
論文審査委員	教 授	渡 辺 得 之 助	教 授	沢 田 昌 雄
			教 授	堀 江 忠 男
			教 授	関 集 三

## 論 文 内 容 の 要 旨

## 本文目録

- 1) 序 論
- 2) 楕円体模型の接觸条件
  - a) 楕円体模型の設定
  - b) 隣接分子の推定
  - c) 結晶対称要素に対する楕円体模型の接觸条件
    - (I)  $\bar{1}$  + Translation
    - (II)  $(2, 2_1)$  + Translation
    - (III)  $(m, \text{glide})$  + Translation
- 3) 楕円体近似による構造決定の例
  - a)  $\gamma$ -pyrazinamide
    - (i) 隣接分子の推定
    - (ii) 接觸条件
    - (iii) 結果及び既知の構造との比較
  - b) p-fluorobenzamide
    - (i) 隣接分子の推定
    - (ii) 接觸条件
    - (iii) 近似構造の決定
    - (iv) 構造の精密化

## 論文審査の結果の要旨

本研究は分子が近似的に楕円体と見做すことができる場合の分子性結晶の結晶構造を解析する一つの一般的方法を論じたものである。

分子性結晶の構造を通覧すれば、分子の外側に各原子の Van der Waals 半径を与えた大きさのものの最密充填と考えられる場合が多いことに着目し、著者は分子を表わす一つの楕円体を考えたとき、結晶の対称操作で与えられる隣接楕円体とが最も密に接する条件を解析的に求めた。

本論文で取扱った結晶の対称要素は (I) 並進 (II) 並進と反転 (III) 2 回対称軸 (回転軸およびらせん軸) と並進 (IV) 並進と対称面 (鏡面および映進面) である。

以上の方法を先づ結晶構造既知の物質  $\gamma$ -ピラジナマイドに適用してその有効なことを確かめ、次いで構造未知の物質 p-フルオルベンズアミドに適用した。この場合、次式

$$P_m(u, v, w) = \frac{1}{V} \sum \sum \sum F^2(hkl) e^{-2b(\sin\theta/\lambda)^2} \cos 2\pi(hu + kv + lw)$$
 で与えられる変形パタソン関数

が分子重心間のベクトルを与えるのであろうことを予想したが、実際にこの方法によって分子の大よその重心の位置を推定することができた。次に2ケの分子が対称心をはさみ、水素結合による二量体を形成することを仮定し、上に述べた楕円体の接触条件から近似構造を求めそれを出発点として最小自乗法およびフーリエ級数法によって構造を決定することができた。

本研究は高木君の独創性に基くもので構造解析の一つの一般的方法を与え、それによって一つの未知の構造を明らかにしたものであって、理学博士の学位論文として充分価値あるものと認める。なお提出された参考論文6篇はいづれも結晶学に寄与した価値ある論文である。