



Title	橿円体近似による分子性結晶の構造決定
Author(s)	高木, 義人
Citation	大阪大学, 1963, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/28659">https://hdl.handle.net/11094/28659</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> 大阪大学の博士論文について

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏名・(本籍)	高木義人
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	橢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) *r*-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観すれば、分子の外側に各原子の Van der Waals 半径を与えた大きいさのもの最も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個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 (鏡面よ構び映進面) である。

以上の方針を先づ結晶構造既知の物質 *r*-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

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

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觸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。