

氏名(本籍)	いけ だ たく じ 池 田 拓 史 (愛 知 県)
学位の種類	博 士 (工 学)
学位記番号	博 甲 第 2206 号
学位授与年月日	平成11年7月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	工学研究科
学位論文題目	X線および中性子回折法を用いたクラスター内包ゼオライトの結晶構造の研究
主査	筑波大学教授 理学博士 大 嶋 建 一
副査	筑波大学教授 理学博士 植 寛 素
副査	筑波大学教授 理学博士 大 成 誠之助
副査	筑波大学教授 理学博士 浅 野 肇
副査	筑波大学教授 理学博士 国 森 公 夫

論 文 の 内 容 の 要 旨

ゼオライトは触媒や漏れキュラーシブに広く用いられ、Si,Al,P,Oの4元素の組み合わせからなる共有結合を持つ物質である。構造の特徴としては大部分のゼオライトの格子定数が10Åを大きく越え単位胞内の原子数は100以上もあり、無機化合物では複雑な部類に属する。ゼオライトは周期的に配列したナノサイズのゲージや細孔を有し、金属、半導体、有機分子等をそれらに内包させ、新機能をもつ物質の創製が盛んに試みられている。

本報告ではまず、ゼオライトの構造解析を前提とした新しいタイプの粉末X線回折装置を製作し、引き続き、粉末回折図形を用いた結晶構造解析のソフトウェアを開発した。一方、ゼオライトにアルカリ金属のカリウムクラスターを内包した化合物及び有機分子を内包した $AlPO_4$ 化合物を合成し、X線及び中性子回折法により回折強度の測定を行った。

その結果、以下の結論を得た。

- 1) 本報告で開発した長尺ソーラースリットと可変型発散・散乱スリットを組み込んだ粉末X線回折装置はゼオライト系の試料に対する測定に有用である事が判った。
- 2) リートベルト精密化プログラムRIETAN-98およびマキシマムエントロピー法MEMによる密度分布解析を取り入れた統合システムREMEDY開発により、これまで困難であった複雑なゼオライトの構造解析に有効である事を検証した。
- 3) 強磁性を示すアルカリ金属内包ゼオライトのX線構造解析にはじめて成功し、空間群をF23であると決定した。REMEDYによる電子密度分布の解析により、カリウムクラスターは α -ゲージに陽イオンの状態で存在し、 β -ゲージ内には K_4^+ 等のクラスターは存在していないことを明らかにした。また、隣接する α -ゲージのクラスターは非等価でその濃度差は比較的緩やかであることも分かった。
- 4) 有機クラスターを内包させた $AlPO_4$ 化合物の構造解析から構造の特徴；次元性、構成分子の配向性等を明らかにした。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本報告は粉末X線及び中性子回折法を用いた新しい構造解析システムを開発し、実用に広く用いられているゼオライトにアルカリ金属をクラスター状に内包した物質や有機分子を内包させた物質の作製および回折法を用いた結晶構造を決定し、物性を議論した。これら一連の仕事はこの種の物質の構造と物性との関連性についての理解および理論的考察に多いに役立つと思われる。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。