

|              |                                                                                 |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Title        | 2次元 X 線回折画像に基づく芳香族ポリウレアの結晶構造解析                                                  |
| Author(s)    | 杉本, 理充                                                                          |
| Citation     |                                                                                 |
| Issue Date   | 1996-03                                                                         |
| Type         | Thesis or Dissertation                                                          |
| Text version | none                                                                            |
| URL          | <a href="http://hdl.handle.net/10119/2211">http://hdl.handle.net/10119/2211</a> |
| Rights       |                                                                                 |
| Description  | 材料科学研究科, 修士                                                                     |

# 2次元X線回折画像に基づく 芳香族ポリウレアの結晶構造解析

杉本 理充 (佐々木研究室)

【はじめに】 等モル量の 4,4'-diaminodiphenylmethane (MDA) と 4,4'-diphenylmethane diisocyanate (MDI) をガラス基板上に真空蒸着し、熱重合させることで芳香族ポリウレア (P(MDA-MDI)) が得られる。電場を印加しながら熱重合して得られた薄膜は、約 200 °C まで圧電性が持続する。本研究では、極性構造を念頭に置き、P(MDA-MDI) の結晶構造解析を行なった。

【実験】 示差走査熱量測定とX線測定により、100 °C 付近で重合が起こり 230 °C で結晶化が起こることが解った。よって、240 °C で熱処理をした試料について構造解析を試みた。X線測定は、CuK $\alpha$  線 (波長 1.5418 Å) を用い、透過法および対称反射法で行った。前者では、基板から剥離した試料片を用い、イメージングプレート検出器により2次元の回折像を得た。後者では、粉碎した試料を用いて測定し、その散乱曲線データを Rietveld 法による解析に用いた。

【結果・考察】 分子構造と単位格子 (斜方晶系) のモデルをそれぞれ図1、図2に示す。a 軸は試料面に垂直で、b 軸および c 軸の分布極大が試料面内にあるような面配向している。この分子構造は二回らせんを持ち無極性である。水素結合は b 軸方向に形成されている。2次元回折画像シミュレーションおよび Rietveld 法による結果は実測とおおよそ一致をみた。以上のことから、電場を印加しながら熱重合させたものでは極性構造をとるが、結晶化により無極性構造に変化するため圧電性が消失するものと考えられる。

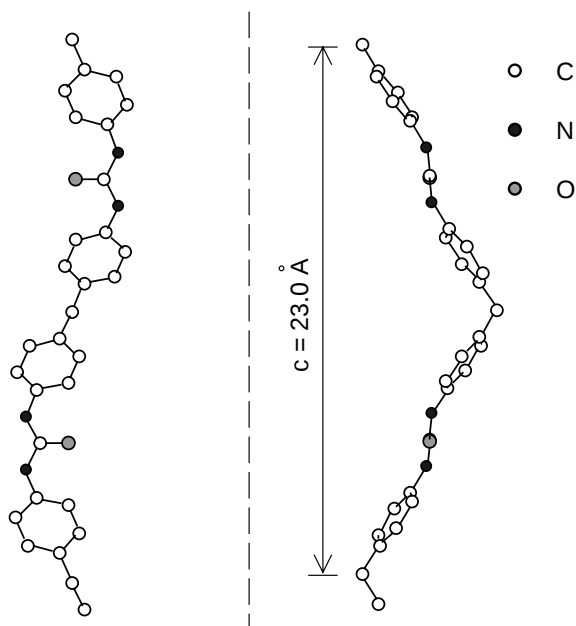


図1: 1周期分の分子構造モデル。

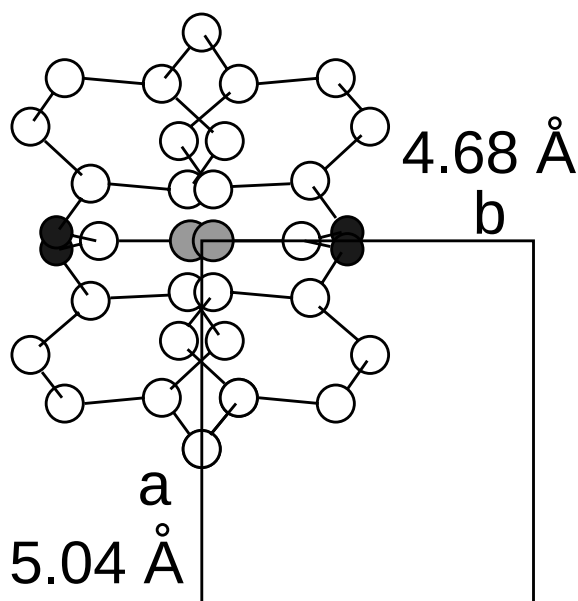


図2: 分子軸 (c 軸) 方向から見た投影図。

keywords

X線回折, 芳香族ポリウレア, 蒸着重合, 極性構造, Rietveld 法