

氏名	松 本 修 治		
授与した学位	博	士	
専攻分野の名称	工	学	
学位授与番号	博甲第1741号		
学位授与の日付	平成10年3月25日		
学位授与の要件	自然科学研究科物質科学専攻 (学位規則第4条第1項該当)		
学位論文題目	珪酸塩およびホウ酸塩系ガラスへの単色X線光電子分光の 適用と電子状態の解析		
論文審査委員	教授 三浦 嘉也	教授 田里伊佐雄	教授 尾坂 明義
	教授 宇野 義幸	教授 東辻 浩夫	

学位論文内容の要旨

本研究は、ガラス材料に対して、単色 X 線を励起源とした光電子分光法(XPS)を適用してエネルギー分解能のよいスペクトルを得るとともに、分子軌道計算を併用して珪酸塩およびホウ酸塩系ガラスの電子状態の解析を試みたものである。従来、ガラスのような電気絶縁体での XPS 測定では“不均一帯電”のために高精度で再現性のあるスペクトルを得ることは困難であった。帯電制御法を種々検討した結果、メッシュスクリーンと低エネルギー電子銃の併用が有効であり、簡便に高精度で再現性のよいスペクトルが得られることを明らかにし、ガラスの XPS 測定手法を確立して、一連の測定を行った。その結果、O1s シグナルのより詳細なピーク分離が可能となり、珪酸塩およびホウ酸塩系ガラスにおいて、化学結合状態の異なる酸化物イオンを分離・定量することができた。また、内殻軌道遷移の化学シフトが、ガラスの Lewis 酸/塩基性と相関することを明らかにした。一方、分子軌道計算から、ホウ酸ガラスと石英ガラスの価電子帯スペクトルのシミュレーションを行い、価電子帯の軌道構成などの電子構造を解明した。

論文審査結果の要旨

本論文は、酸化物ガラスに対して単色 X 線を励起源とした光電子分光法(モノクロ XPS)を適用してエネルギー分解能の良いスペクトルを得るとともに分子軌道計算を併用してガラスの電子状態の解析を試みたものである。ガラスのような電気絶縁体のモノクロ XPS 測定では試料表面の不均一帯電のため高精度で再現性あるスペクトルを得ることは困難であった。松本君は石英ガラスを例にとり、帯電制御法を種々検討した結果、金属メッシュスクリーンと低エネルギー電子銃の併用が有効であり、簡便に高精度で再現性の良いスペクトルが得られることを明らかにし、ガラスの XPS 測定手法を確立した。この手法を用いて珪酸塩およびホウ酸塩系ガラスについて一連の系統的測定を行った。O1s シグナルの詳細な検討からガラスにおける化学結合状態の異なる酸化物イオンを分離・定量することができ、例えば、ホウ酸塩ガラスでのホウ素の酸素配位数変化と非架橋酸化物イオンの生成をアルカリ金属イオンの酸性度の強弱と soft/hard 性で分類できることなどを XPS から明らかにした。また、種々のイオンの内殻軌道遷移の化学シフトがガラスの Lewis 酸・塩基性と相関することを明らかにし、例えば、ホウ素の酸素配位数変化とガラスの塩基度の相関を O1s 束縛エネルギーの値から定量的に説明した。一方、ホウ酸ガラスと石英ガラスの価電子スペクトルを DV-X α 分子軌道計算でシミュレートし、価電子帯の軌道構成などの電子構造を明らかにした。

以上のように本論文は、珪酸塩およびホウ酸塩ガラスで代表される酸化物ガラスの XPS 情報と分子軌道計算によってガラスの電子状態について詳しい検討を加えたものであり、基礎的かつ本質的な知見を得ており、ガラスの理工学に対する貢献は大きいと認められる。

論文の内容、論文発表会および参考論文を総合的に審査した結果、本論文が博士(工学)の学位論文に値するものと認定する。