

# 中性子による軽水素有機化合物の 構造解析検討

利用者 伊藤弘、伊藤孝憲、小林香奈

所属 AGCセイミケミカル株

## 1. はじめに

中性子を用いる構造解析の魅力の一つとして、水素(H)についての情報を得ることができることがある。X線構造解析では有機物のC,N,O等の情報しか得られないが、中性子では反応に重要であるHについて議論が可能となる。しかし、実際はHの非干渉性散乱が大きく、精度の高い構造解析が困難となっている。そこでHを非干渉性散乱が小さく、干渉性散乱が大きい重水素(D)に置換することで改善することが可能となる。(図1参照)しかし、D置換はコスト、時間がかかり、またHを全てDに置換することは困難である。そこで本研究では中性子3軸分光器(TAS-1)にて弾性散乱、偏極中性子によって非干渉性散乱の低減を狙い、D置換なしでも精度が高い構造解析が可能であるか検討することを目的とした。

## 2. 実験方法

試料としてグルコース(和光純薬製)を用いた。10 のバナジウム管に試料を詰め、室温で測定を行った。波長: 2.357Å、アナライザーによって弾性散乱回折、また偏極中性子を用いて弾性散乱回折を行った。

## 3. 実験結果

図2に中性子弾性散乱回折パターンを示す。アナライザーによって非干渉性散乱を除くことを試みたが、10%程度しか除くことができなかった。図3にHRPD回折測定とTAS-1弾性散乱、偏極中性子による回折測定の比較を示す。偏極中性子を用いることによって、バックグラウンド(BG)を1/3に低減することができた。Hを含む有機材料等の構造解析には有効であると考えられる。しかし、ピーク半値幅(FWHM)はHRPDと比べると大きく、角度分解能が低い。また、偏極中性子を用いる回折実験は強度が1/10となり、測定時間が長くなる。

## 4. まとめ

弾性散乱によって非干渉性散乱を取り除くことは困難であった。一方、偏極中性子を用いることで非干渉性散乱を1/3に低減することができた。今後、分解能、中性子強度の高い回折計に偏極中性子測定手法が導入されることによって、有機材料をD置換することなく精度の高い構造解析が可能になると考えられる。

## 5. 謝辞

TAS-1の測定、偏極中性子に関しまして、日本原子力研究開発機構、中性子偏極解析磁性研究グループ、武田全康博士、加倉井和久博士、HRPDデータ提供に関しては新エネルギー材料研究グループ、井川直樹博士に多大なご協力を頂きここに感謝の意を表します。

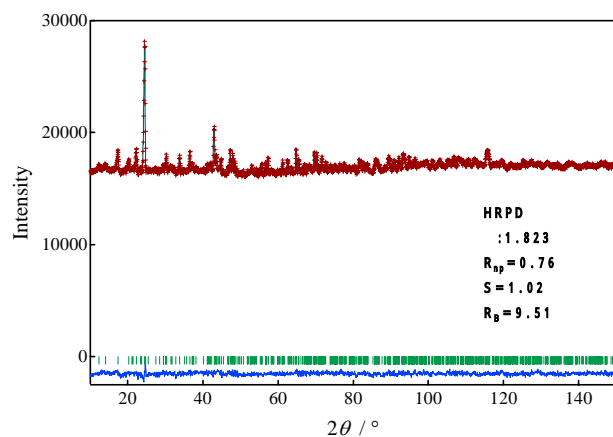


図1. (a) D置換なしグルコース

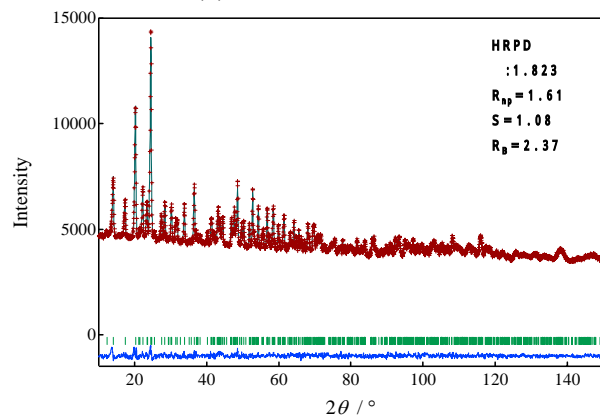


図1. (b) D部分置換グルコース

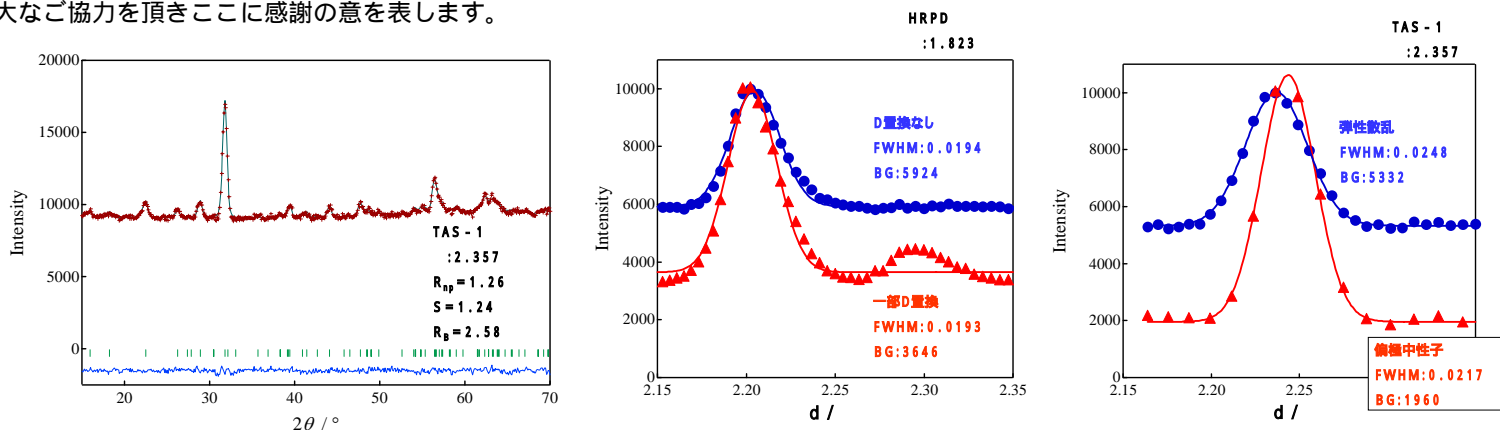


図2. 弾性散乱回折パターン

図3. (a)HRPDにおける回折パターン

(b)弾性散乱、偏極中性子を用いた回折パターン