 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2008P0014 実験課題名 Title of experiment 粉末中性子解析法を用いた有機分子の結晶構造解析に関する研究 実験責任者名 Name of principal investigator 石垣 徹 所属 Affiliation 茨城大学 フロンティア応用原子科学研究センター	装置責任者 Name of responsible person 石垣 徹 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iMATERIA / (BL20) 実施日 Date of Experiment 平成 21 年 11 月 21 日 0 時 ~ 平成 21 年 11 月 21 日 9 時

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form. シメチジン粉末 $C_{10}H_{16}N_6S$ エーザイ(株)より提供

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons. シメチジン粉末を内径 10 mm の試料ホルダーに詰め、He 雰囲気下で密封したものを測定試料とし、粉末回折装置 iMATERIA で測定した。1 回目の測定は温度を 100K にコントロールして約 7 時間測定を行った。測定終了後、同試料を温度 293K にコントロールして約 7 時間測定を行った。 H の非干渉性散乱により、バックグラウンドが高いものの、D 置換をしていない、有機物でも中性子回折パターンの測定が、現実的な測定時間で測定可能である事が示された。今後、種々の有機物について測定を実施し、有機物の粉末回折への応用をはかっていく事を検討していきたい。 測定したデータを Z-rietveld で解析した結果のリートベルト解析パターンを図1(100K)および図2(293K)に示す。Z-rietveld は分子構造による制約条件に対応していない等、問題は有るものの、解析により得られた構造パラメータは、論文等に出ている構造パラメータと大きく違うものではない結果となっており、iMATERIA を使った D 化をしない有機分子の構造解析が実施可能となる見込みが得られた。今後は、Z-rietveld 開発チームとの連携で、分子構造の解析に対応できるように、はかっていってもらうとともに、データの補正等の検討をより進めていく予定である。

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

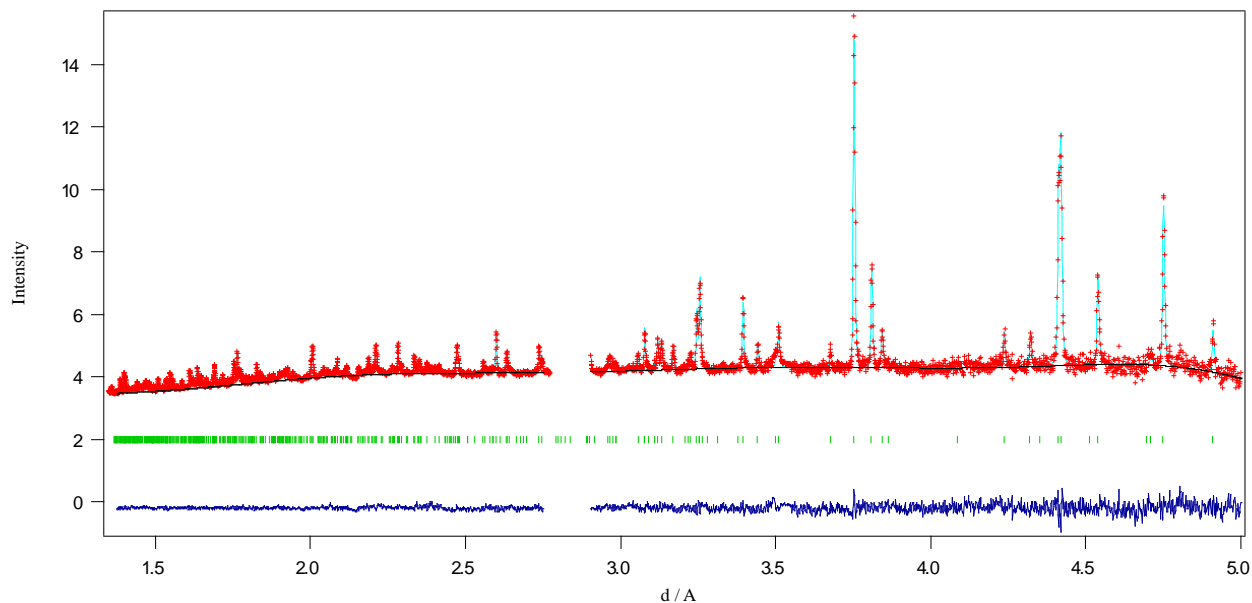


図1 シメチジンの 100K におけるリートベルト解析パターン。

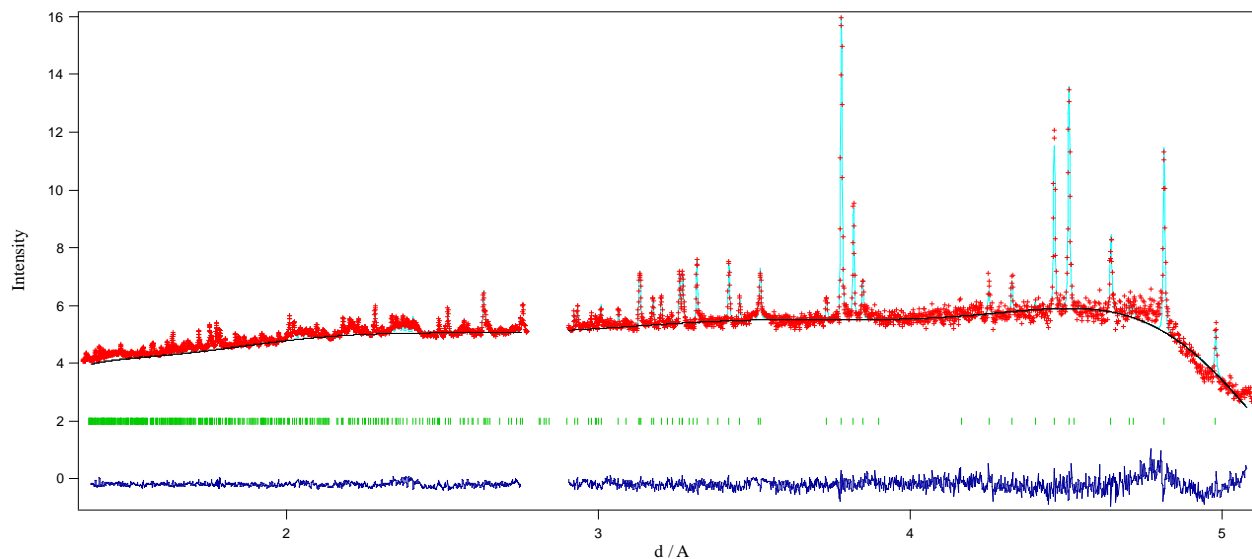


図2 シメチジンの室温におけるリートベルト解析パターン