

 <b>MLF Experimental Report</b>	提出日 Date of Report 平成 21 年 4 月 13 日
課題番号 Project No. 2009AP0007 実験課題名 Title of experiment ポリオキシメタレート結晶中に形成される六角形水クラスタの構造 実験責任者名 Name of principal investigator 尾関智二 所属 Affiliation 東京工業大学	装置責任者 Name of responsible person 田中伊知朗 装置名 Name of Instrument/(BL No.) 生命物質構造解析装置 実施日 Date of Experiment 平成 21 年 12 月 22 日(火)~平成 21 年 2 月 23 日(水)

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.
モリブデン酸エチレングリコール錯体(単結晶)

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.
<p>モリブデン酸エチレングリコール錯体結晶を用いて単結晶中性子回折実験を行った。加速器出力が設計値を大きく下回っていたことと、マシンタイムが 24 時間に限られていたことから、当初予定していた六角形水クラスタを含むポリオキシメタレート結晶の構造解析を行い、課題申請理由である水分子の構造研究に関する意味のある結果を得ることは不可能と判断した。そこで、第二候補であるモリブデン酸エチレングリコール錯体の構造解析を行うこととした。この試料は強度の異なる分子間の水素結合が複数見られる結晶であり、水素結合の強さと水素原子位置との相関について、興味を持たれる化合物である。iBIX による測定の結果、全ての水素原子について、位置を求めることが出来た。従来の報告では、中性子で求めた O-H 距離は、X 線から求めた O-H 距離よりも長くなることが知られている。一方、この試料においては、X 線では O-H 距離が異常に長く求められていたものが、中性子による結果では通常の範囲であることが明らかとなった。現在、中性子回折データの補正などを行うことにより、結果の信頼性を向上させるとともに、量子化学計算から、水素結合周囲での電子密度の計算を行っている。</p>