


|   |   |
|---|---|
|  <b>MLF Experimental Report</b>  | 提出日 Date of Report  |
| 課題番号 Project No.<br>2010BM0001<br>実験課題名 Title of experiment<br>CO <sub>2</sub> を吸収したモノエタノールアミン水溶液の構造解析<br>実験責任者名 Name of principal investigator<br>出口 博史<br>所属 Affiliation<br>関西電力(株) | 装置責任者 Name of responsible person<br>石垣 徹<br>装置名 Name of Instrument/(BL No.)<br>iMATERIA(BL20)<br>実施日 Date of Experiment<br>2011/1/23-24 |

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.              |  |
| <sup>15</sup> Nに置換したモノエタノールアミン重水溶液  | $(^{15}\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_{0.112}(\text{D}_2\text{O})_{0.888}$                      |
| 上記重水溶液にCO <sub>2</sub> を吸収させたもの   | $(^{15}\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_{0.112}(\text{D}_2\text{O})_{0.888}(\text{CO}_2)_{0.058}$ |
| 自然同位体比(99.6% <sup>14</sup> N)のモノエタノールアミン重水溶液  | $(^{14}\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_{0.112}(\text{D}_2\text{O})_{0.888}$                      |
| 上記重水溶液にCO <sub>2</sub> を吸収させたもの   | $(^{14}\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH})_{0.112}(\text{D}_2\text{O})_{0.888}(\text{CO}_2)_{0.058}$ |
| 重水 D <sub>2</sub> O   |  |
| <sup>0</sup> H <sub>2</sub> O (H <sub>2</sub> O) <sub>0.64</sub> (D <sub>2</sub> O) <sub>0.36</sub> |  |

|   |
|---|
| 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。)<br>Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.  |
| <p>(実験方法)</p> <p>6種類の溶液試料をそれぞれ直径6mmのバナジウムセルに注入し、インジウムシールを行った後、中性子照射チャンバーにセットした。各試料の測定時間は5時間とした。</p> <p>(結果)</p> <p>測定されたデータの精度を検証するため、最初に重水のデータの解析を行った。得られたデータのうち、2θ = 15°, 25°, 35°の各バンクのデータを組み合わせ、吸収補正、多重散乱補正などを行った後、水素からの平均散乱長をゼロとする<sup>0</sup>H<sub>2</sub>Oのデータを利用して非弾性散乱補正を実施した。最終的に得られた重水の干渉項<i>i</i>(Q)を図1に示す。文献で報告されている<i>i</i>(Q)と比較して統計精度の高い優れた結果が得られた。</p> <p>このように、iMATERIAを利用することにより水溶液系の構造解析が可能であることを確認できたので、現在モノエタノールアミン(MEA)重水溶液のデータ解析を進めている。本課題では、<sup>14</sup>Nと<sup>15</sup>N同位体分率のみが異なり他の条件は全く同一としたMEA重水溶液試料に対してそれぞれ中性子散乱実験を実施し、観測さ</p> |

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

れた散乱強度の差に注目して解析を行うことにより、N原子周囲の構造のみを選択的に導き出すことを目的としている。現在得られている結果の例として、CO<sub>2</sub>吸収後のMEA重水溶液に対して、<sup>14</sup>Nと<sup>15</sup>Nとの差分により得られた干渉項 $\Delta_N(Q)$ を図2に、それをフーリエ変換して得られた差分動径分布関数 $G_N(r)$ を図3に示す。図2の差分干渉項は統計精度が高く、構造に由来する振動構造が明確に認められた。また図3の差分動径分布関数では、N-H、N-Cといった分子内原子対や、N $\cdots$ H、N $\cdots$ D<sub>2</sub>Oといった分子間原子対によるピークを観察することができた。詳細は現在解析中である。

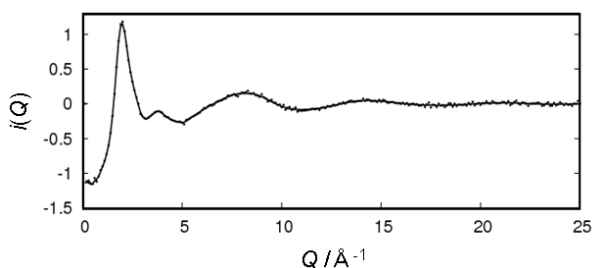


図1 重水の干渉項

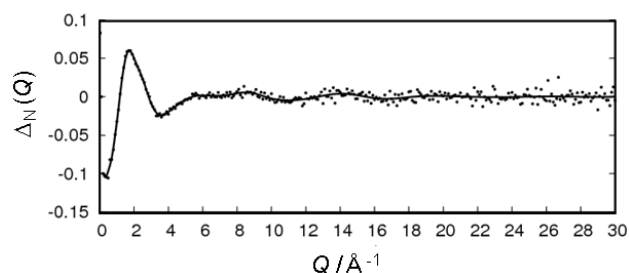


図2 CO<sub>2</sub>を吸収したMEA重水溶液における<sup>15</sup>Nと<sup>14</sup>Nとの差分干渉項

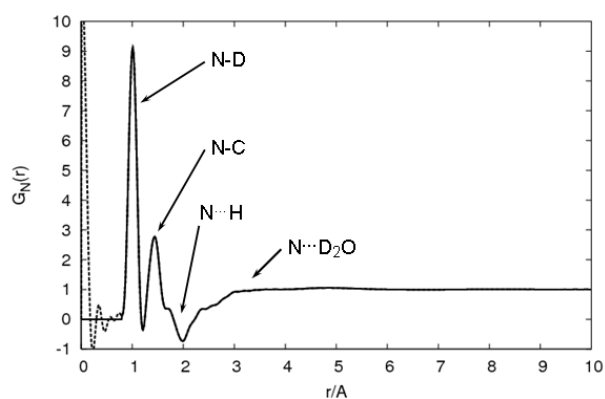


図3 CO<sub>2</sub>を吸収したMEA重水溶液における窒素原子周囲の動径分布関数