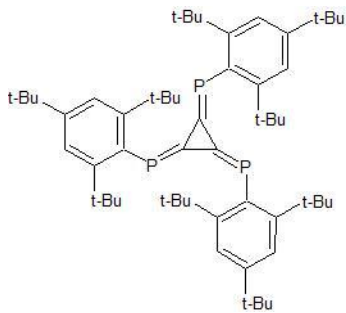


 <b>MLF Experimental Report</b>	提出日 Date of Report 2014年10月17日
課題番号 Project No. 2013PX0007 実験課題名 Title of experiment 重原子を含む化合物中の水素原子パラメーターの精密決定法の開発 実験責任者名 Name of principal investigator 橋爪 大輔 所属 Affiliation 独立行政法人理化学研究所創発物性科学研究センター	装置責任者 Name of responsible person 日下 勝弘 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iBIX (BL03) 実施日 Date of Experiment 2013年5月19日から5月23日

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.  Sample Name: 4,5,6-tris(2,4,6-tri-tert-butylphenyl)triphospha[3]radialene  Chemical Formula: $C_{57}H_{87}P_3$	
---	--

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>C-C 単結合からなるシクロプロパンは <math>sp^3</math> 軌道の軌道間角よりも、顕著に小さい結合角であるため、C-C 結合の結合電子が結合軸から環の外側に分布する。このような結合は、その結合電子の分布から、bent bond と呼ばれている。</p> <p>トリフォスファ[3]ラジアルレンは、三員環に exocyclic な C=P 結合を有する化合物である。この C=P 結合のため、三員環の炭素原子が <math>sp^2</math> 混成となり、無置換シクロプロパンよりも bent bond の程度が大きいと考えられる。そこで、実験的に結合状態を明らかにするために、結合電子の分布を精密な X 線回折データと中性子回折データを用いた、X-N フーリエ合成によって、得ることを目的に本実験を行った。</p> <p>実験は、iBIX に窒素吹付型低温装置をセットし、100 K においてデータ測定を行った。2.1 x 1.7 x 0.9 mm<sup>3</sup> (3.2 mm<sup>3</sup>) のブロック状結晶を、アルミニウム棒にエポキシ樹脂接着剤で</p>
---

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

固定し、290 K において回折装置にマウントした。その後、急激な冷却による試料へのダメージを避けるために、1 K/min のレートで試料を冷却し、100 K とした。1 セット 4 時間の露光でデータ測定を行った。

現在、データ処理を含め解析を行っているが、R factor が 50% と現実的な値ではない。回折斑点は明瞭に観測されているので、データ処理操作を検討し、目的達成に努めている。