

減衰全反射遠紫外分光分析法を用いた多環式アルカンの電子状態の研究

(近畿大院総合理工¹・近畿大理工²) ○檜垣 優悟¹、森澤 勇介²

Investigation of electronic states for polycyclic alkanes by Attenuated Total Reflection spectroscopy in the FUV region (¹Graduate School of Science and Engineering, Kindai University, Japan, ²School of Science and Engineering, Kindai University, Japan) ○Yugo Higaki,¹ Yusuke Morisawa,²

A core structure of steroid has 3 fused cyclohexane and cyclopentane rings. Decahydronaphthalene (decalin) consists of two cyclohexane rings and is classified in polycyclic alkanes, specially condensed two rings system. Because of dihedral angle for two hydrogens in 4a- and 8a-carbons, decalin occurs cis and trans forms, which have different chemical and physical properties each other such as pharmacological activities and refractive indexes. We therefore investigated electronic states of decalin which is involved in core chemistry for saturated-hydrocarbon fused ring compounds. We have already investigated electronic transitions from σ -electron which are observed in Far-UV region using attenuated total reflection (ATR-) technique. Decalins has absorption bands in 145 and 170 nm for cis-form and 160 and 170 nm for trans-form. The bands are assigned with quantum chemical calculations and comparing with ATR spectra of cyclohexane. We also investigated for electronic state for adamantane, which is known as diamondoid. Absorption bands at ~ 160 nm with vibronic structure is assigned to electronic transition from HOMO-1 to Rydberg 3p.

Keywords : polycyclic alkane, σ -electron, Diamondoid

ステロイドなどの生体分子にはシクロヘキサン環による多環式化合物が存在し、その構造の核となるのは縮合環構造である decahydronaphthalene (decalin) 骨格である。4a 位と 8a 位の水素の立体配座によって cis 体と trans 体の 2 種類の幾何異性体が存在し、薬理活性などの化学的性質や屈折率などの物理的性質の違いが知られている。この decalin の電子遷移を観測することで、光学的な性質を推測する助けになると思われる。そのため、我々はこれらの縮合環式飽和炭化水素の化学の核を成す σ 電子の状態を研究した。 σ 電子の電子遷移は液体でも Far-UV 域に観測されるが、 $10 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ のモル吸光係数を持つことが減衰全反射法 (ATR 法) を用いた研究で明らかになっている。decalin では、Fig. 1 に示すように cis 体で 145 nm と 170 nm、trans 体で 160 nm と 170 nm に吸収バンドが観測された。量子化学計算を行い、それぞれの吸収バンドについて帰属し、シクロヘキサンの電子遷移との比較を行った。ダイヤモンド様分子として知られる Adamantane についても同様に電子状態を調査した結果、160 nm 付近に振電遷移が観測され、HOMO-1 から Rydberg 3p 軌道への遷移と帰属された。

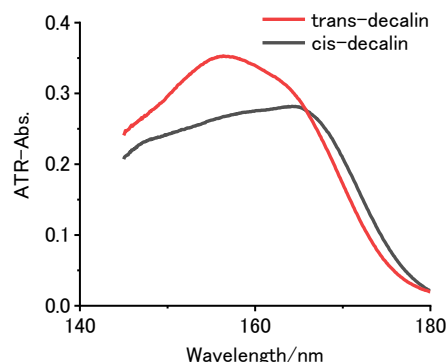


Fig. 1 decalin の ATR-FUV スペクトル