

水溶液中における芳香族化合物の分子間振動：電荷の影響

(千葉大理) ○清水 柁子・城田 秀明

Intermolecular Vibrations of Aromatics in Aqueous Solution: Charge Effects (*Department of Chemistry, Chiba University*) ○Masako Shimizu, Hideaki Shiota

In this study, we have investigated the intermolecular vibrations of imidazole, imidazolium chloride, triazole, and sodium triazolidine in aqueous solution by means of femtosecond Raman-induced Kerr effect spectroscopy. The main objective is to clarify the effects of charge on the aromatic ring libration in solution. It was found that the spectrum width of the intermolecular vibrational band in imidazolium cation is broader than that in imidazole. However, the spectrum width in triazolidine anion is narrower than that in triazole. The difference spectra between the solutions and neat water showed similar tendencies in the charge effects on the spectrum width. The first moments of the difference spectra between the solutions of charged aromatics and neat water are slightly higher in frequency than those between the solutions of neutral ones and the solvent.

Keywords : femtosecond Raman-induced Kerr effect spectroscopy; low-frequency spectrum; intermolecular vibration; aromatics

本研究では、フェムト秒ラマン誘起カー効果分光により、水溶液中における芳香族化合物の分子間振動に及ぼす電荷の影響について検討した。正電荷の検討にはイミダゾールとイミダゾール塩酸塩を、負電荷の検討にはトリアゾールとトリアゾールナトリウム塩を用いた。それぞれの比較から、約 200 cm^{-1} 以下の低振動数領域のスペクトルの形状は、正電荷を持つ芳香族化合物では幅が広く、負電荷を持つ芳香族化合物では幅が狭くなった。また、純粋な水との差スペクトルについても同様に、イミダゾール塩酸塩ではイミダゾールよりも幅が広く、トリアゾールナトリウム塩ではトリアゾールよりも幅が狭くなった。一次モーメントについては、どちらの電荷を持つ場合でも、電荷により高振動数側への若干の変化が確認された。

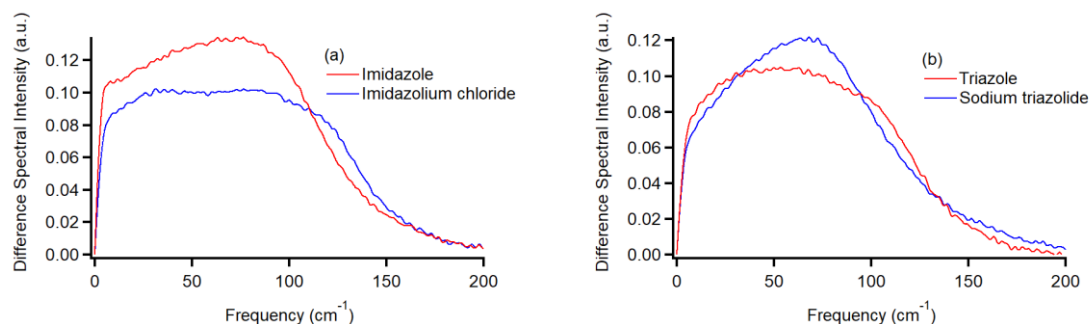


Fig. 1. Difference spectra of (a) aq. imidazole and imidazolium chloride solutions and (b) aq. triazole and sodium triazolidine solutions relative to neat water.