

超音速ジェット分光法による Phenylethanol 誘導体の蛍光スペクトル

(青学大院理工) ○長澤 宏成・柏原 航・鈴木 正

Fluorescence Spectra of Phenylethanol Derivatives by Supersonic Jet Spectroscopy (*Graduate School of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University, Japan*) ○Hironari Nagasawa, Wataru Kashiwara, Tadashi Suzuki

The OH / π interaction between the OH group and the aromatic π electron system is important for understanding the molecular structure. In this study, laser-induced fluorescence (LIF) excitation spectrum and dispersion fluorescence (DF) spectrum of 2-(*p*-methoxyphenyl)ethanol (MPE) in a jet expansion were measured. In the LIF excitation, two bands were observed at 35553 cm^{-1} (Band A) and 35612 cm^{-1} (Band B). The structural optimization calculations predicted that the most stable structure of MPE in the structure with intramolecular OH/ π interaction (Gg π , Gg π'). By considering the quantum chemical calculation and the DF spectrum, we assigned Band A to the 0^0 band of the most stable structure Gg π' and Band B to the 0^0 band of Gg π .

Keywords : Supersonic Jet Spectroscopy; OH/ π Interaction; Quantum Chemical Calculation

OH 基と芳香族 π 電子系の間に働く OH/ π 相互作用は分子構造を理解する上で重要である。2-phenylethanol (PE) の分子構造の研究では分子内 OH/ π 相互作用の存在が報告されている¹⁾。本研究では、超音速ジェット分光法を用いて、PE にメトキシ基を導入した 2-(*p*-methoxyphenyl)ethanol (MPE) のレーザー誘起蛍光 (LIF) 励起スペクトル測定、分散蛍光 (DF) スペクトル測定および量子化学計算を行った。構造最適化計算の結果、MPE の最安定構造 (Gg π) および 2 番目に安定な構造 (Gg π') は、PE と同様 OH 基がベンゼン環に配向し、分子内 OH/ π 相互作用が存在する構造であることが予測された (Fig. 1 (a))。Fig. 1 (b) に LIF 励起スペクトルを示す。35553 cm^{-1} に最低波数バンド (Band A) が観測された。また、35612 cm^{-1} に最も高強度のバンド (Band B) が観測された。量子化学計算結果と観測された DF スペクトルをあわせて考察することで、Band A は最安定構造 Gg π' の 0^0 バンド、Band B は Gg π の 0^0 バンドであると帰属した。今後、OH 伸縮振動波数の測定を行い、分子内 OH/ π 相互作用の駆動力について議論する。

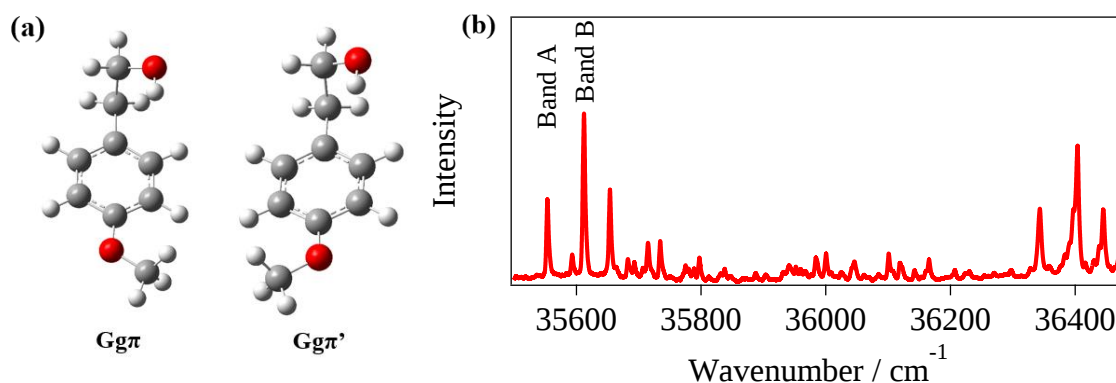


Fig. 1 (a)MPE の異性体 Gg π ,Gg π' と (b)LIF 励起スペクトル.

1) M. Mons *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **1999**, 310, 423.