

ハロゲン基を置換したベンゾフェノン誘導体の分子拡散過程

(青学大院理工) ○平本 宗太郎・柏原 航・鈴木 正

Molecular diffusion process of halogen-substituted benzophenone derivatives proved by transient grating method (*Graduate School of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University*) ○Sotaro Hiramoto, Wataru Kashiwara, Tadashi Suzuki

Diffusion process of molecules in solution is important for understanding the reactivity in chemical reactions. The Stokes-Einstein equation shows a relation between the molecular radius and the diffusion coefficient. However, it is still unclear how molecular structure affects molecular diffusion. In this study, we investigated the molecular diffusion process of various halogen-substituted benzophenones using the transient grating (TG) method. The diffusion of benzophenone substituted with a halogen atom at the 2-position was slower than that of benzophenone substituted at the 3- or 4-position. The optimized structure of the benzophenones showed that the torsion angle of the phenyl group was larger only for the benzophenone substituted at the 2-position, suggesting that small difference of the torsional angle of the phenyl groups should have a significant effect on the diffusion coefficient.

Keywords : Diffusion of molecules; Transient grating method; Benzophenone derivatives; Molecular structure

分子拡散は化学反応を理解する上で重要である。ストークス・アインシュタインの式では分子拡散の大きさを表す拡散係数と、分子半径に相関があることを示している¹⁾。しかし、分子構造が分子拡散にどのような影響を及ぼすかについては現在も詳しくわかっていない。本研究では過渡回折格子 (TG) 法を用いて、様々なハロゲン置換したベンゾフェノンの分子拡散過程を調べた。その結果、2位の位置にハロゲン基を置換したベンゾフェノンは、3位、4位に置換したものより拡散が遅くなることが明らかとなった。量子化学計算を行った結果、2位の位置に置換したベンゾフェノンのみフェニル基のねじれ角が大きくなった。フェニル基の微小なねじれ角の違いが拡散係数に大きく影響を及ぼすことを示唆している。

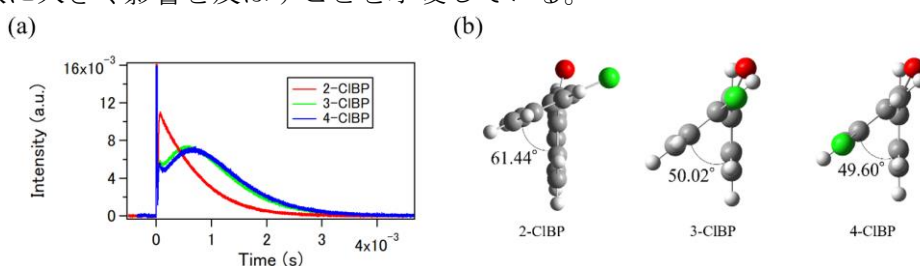


Fig. 1. (a) The TG signals of Chlorobenzophenones (2-CIBP (red) , 3-CIBP (green) and 4-CIBP (blue)) in Ar-saturated methanol. (b) Optimized structures of CIBP calculated at the B3LYP/6-31G+(d) level.

1) J. T. Edward, *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47, 261.