

減衰全反射遠紫外分光法によるテトラヒドロピランとその誘導体の電子状態の研究

(¹近畿大理工) ○森澤 勇介¹・檜垣 優悟¹

Study for electronic states of tetrahydropyran and its derivatives in the liquid state by attenuated total reflectance spectroscopy (¹*School of Science and Engineering, Kindai University*) ○Yusuke Morisawa,¹ Yugo Higaki,¹

Electronic structure of σ orbitals and their hyper-conjugation play an important role in the conformation preference and reactivity in saturated-organic molecules. A nonbonding electronic orbital introducing the saturated structure is interacted with the σ orbitals. The electronic states of tetrahydropyran and its methyl and hydroxy substitute have been investigated in the gas phase using far ultraviolet spectroscopy to reveal the interaction in the saturated cyclic carbohydrate. However, detailed assignment of the transition and relation between electronic transition and structure has not been investigated. Here we show the FUV spectra of tetrahydropyran and its methyl and hydroxy derivatives in the liquid states by attenuated total reflectance spectroscopy. The difference in FUV spectra in the introduction of oxygen was compared with cyclohexane and its derivatives.

Keywords : FUV spectroscopy; Saturated cyclic hydrocarbon, tetrahydropyran,

s 軌道は有機分子の骨格を形成する共有結合を作る軌道であり、その電子構造は異性体や反応の選択律に大きな影響を与えると考えられる。s 軌道は分子内に酸素原子のような非共有電子対 (n 軌道) を持った原子を導入することにより、電子構造に変化をもたらすことが知られている。これまでに、 σ 軌道と n 軌道の相互作用や糖の電子状態を明らかにするために、限定した分子の気相 FUV スペクトルが観測され構造の違いによるスペクトルの変化が報告された。しかし、電子遷移の帰属や電子構造の解明には至っていない。今回、我々はテトラヒドロピラン、4-メチルテトラヒドロピラン 4-テトラヒドロピラノール及び、4-テトラヒドロピランメタノール(Fig 1)を用いてスペクトルの帰属と吸収波長の変化を調査した。OH 基の n 軌道における電子遷移に関して、ATR-FUV 法を用いた研究例がメタノール⁵やポリエチレングリコール⁶において報告されている。これらにおいて報告されたアルコール、エーテルに関する帰属を参考に、時間依存密度汎関数法を用いた量子化学計算によるシミュレーションスペクトルとの比較を通して、スペクトルの帰属を試みた。

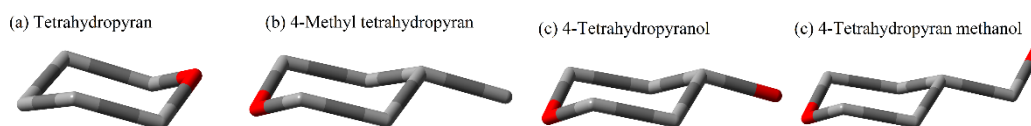


Fig 1 今回測定した分子