

ベンジルアルコール-ベンゼンヘテロダイマーイオン
の分子間相互作用

(九大院理・分子研) ○井筒 弘信・大橋 和彦・井口 佳哉・日野 和之・
西 信之・関谷 博

Intermolecular interaction in the benzene-benzyl alcohol hetero-dimer ion
Kyushu Univ. and IMS ○H. Izutsu, K. Ohashi, Y. Inokuchi, K. Hino, N. Nishi,
and H. Sekiya

【はじめに】ベンゼンとベンゼン誘導体からなるダイマーイオンは、主として電荷共鳴 (CR) あるいは水素結合相互作用のいずれかにより安定化している。例えば、 $[\text{C}_6\text{H}_6]_2^+$ 、 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3]^+$ では前者が、 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2]^+$ 、 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]^+$ では後者が支配的であることが示されている。今回、ベンジルアルコール ($\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}$) とベンゼンとのヘテロダイマーイオン ($[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$) において、どちらの分子間相互作用が優勢であるかについて調査した。

【実験】イオンビームガイド型の光解離分光装置を用いて、赤外領域 ($3100\text{--}3800\text{ cm}^{-1}$) の振動スペクトルを測定した。また、飛行時間質量選別法を利用した光解離分光装置を用いて、近赤外領域 ($750\text{--}1400\text{ nm}$) の電子スペクトルを測定した。

【結果と考察】図 1 に $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ の OH 伸縮振動領域のスペクトルを示す。 3662 cm^{-1} 付近にシャープなバンドが観測された。この振動数は、 $[\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ の OH 伸縮振動数とほぼ一致しており、ベンジルアルコールの OH 基は、ベンゼンの π 電子と相互作用していないことを示している。図 2 に $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ の電子スペクトルを示す。縦軸は $[\text{C}_6\text{H}_6]_2^+$ の吸収極大 (920 nm) に対する相対断面積である。 950 nm 付近に CR 相互作用に基づく吸収帯が観測された。CR 吸収帯の出現は、ベンジルアルコールとベンゼンの芳香環の間に、CR 相互作用が存在することを示している。これらの結果から、 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ において、ベンジルアルコールとベンゼンは π 水素結合しておらず、CR 相互作用が優勢であるといえる。

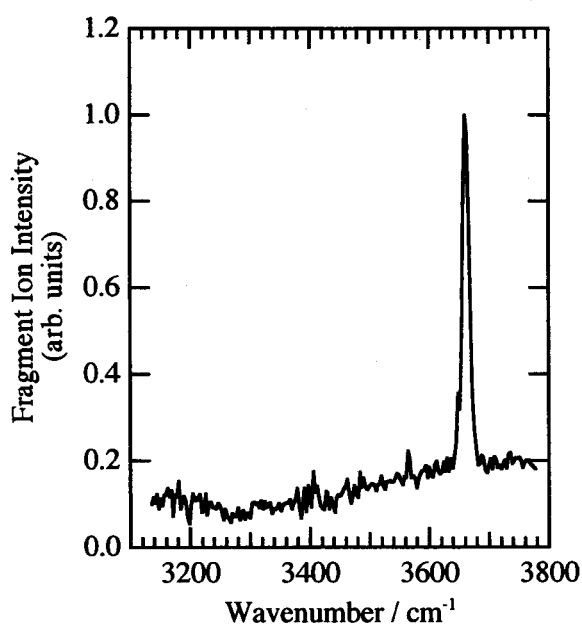


図 1 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ の振動スペクトル

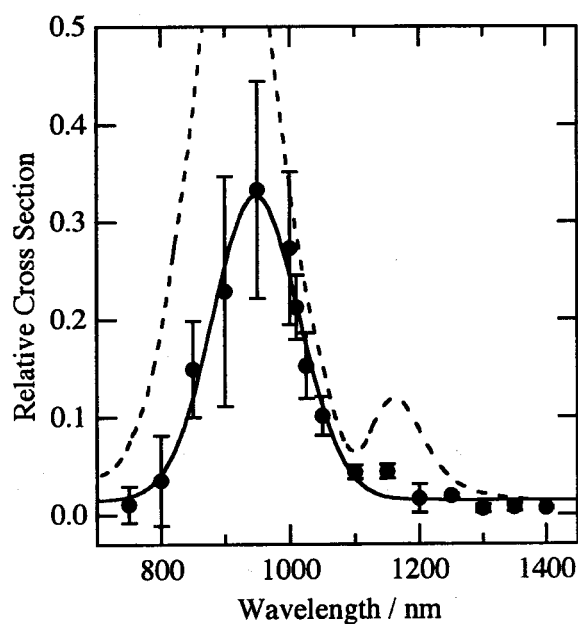


図 2 $[\text{C}_6\text{H}_6-\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}]^+$ の電子スペクトル