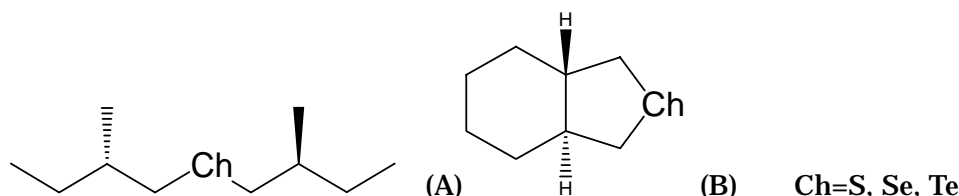


鎖状および環状カルコゲン化合物の UV、CD スペクトルの計算

栗原篤史^a 本田康^a 波田雅彦^a 中辻博^b^a 首都大学東京理学研究科化学専攻(〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1)^b 京都大学工学研究科合成・生物化学専攻(〒615-8510 京都市西京区京都大学桂)

【緒言】 鎖状および環状カルコゲン化合物 bis(2-methylbutyl)chalcogenide (A)と 2-chalcogenahydrindan (B)は、カルコゲン=S, Se, Te について、UV, CD スペクトルが測定されている。しかしながらカルコゲンの種類によってピーク数が変わるため解析が容易でなく、それらの帰属も確立していない。我々はこれらのスペクトルを SAC/SAC-CI 法を用いて計算し、各ピークに信頼の置ける帰属を与えるとともに、ピーク数が変化する要因についても解析をした。



【結果】 図1に環状S化合物のCDスペクトルの計算結果()を実験値(---)とともに示す。計算スペクトルは実験スペクトルと良好に一致している。今回の帰属を基に、同じ素性のピークを線で結んだ実験スペクトルを図2に示す。Te化合物におけるピーク数の増加は3重項励起(1^3A , 1^3B , 2^3B)によるものと結論した。それらを除けば、カルコゲンが変わってもスペクトル全体の傾向は変わらないことが分かる。単にスペクトルの形状の類推から同じ結論に至った Laur の示唆¹にピークを帰属する事で根拠を与えることが出来た。

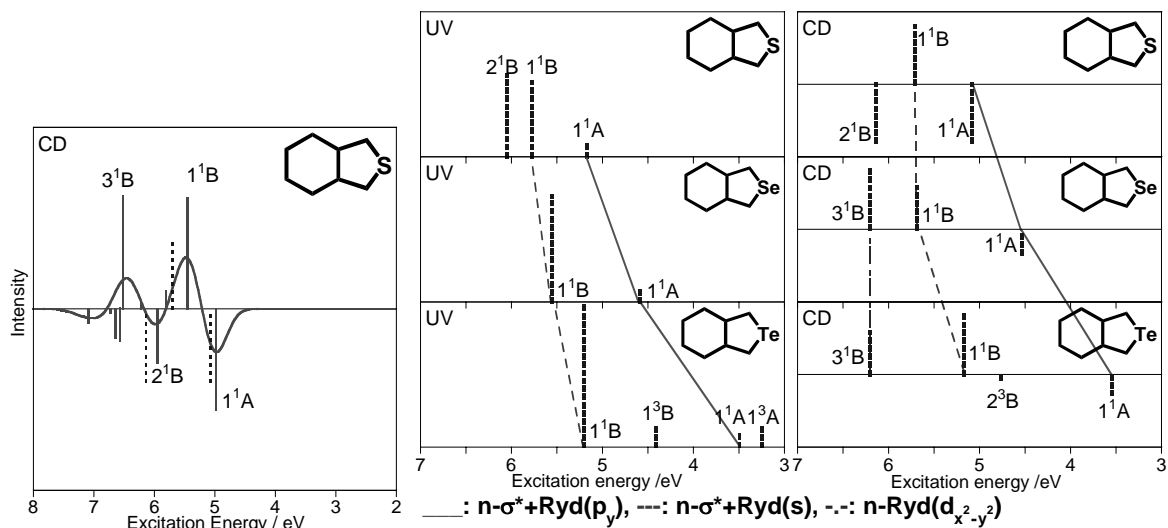


図1 (-)-(S,S)-thiahydrindan の CD スペクトル
計算値()、実験値(---)

図2 (-)-(S,S)-chalcogenahydrindan の UV(左)、CD(右)スペクトルの
実験値(---)と各ピークの対応関係(, ---, ..., -)

¹ Peter H. Laur, "Proceedings of the Third International Symposium on Organic Selenium and Tellurium Compounds" ed. D. Cagniant, and G. Kirsch, Univ. de Metz (1981) p.217-299.