

## 乱れを含んだペラルゴン酸カリウム塩の基準振動計算

(自宅) ○石岡 努

(序) 生体膜の構成物質であるとトリグリセライドやそのモデル物質である脂肪酸メチルエステルではヘッドグループの構造の乱れによりアルキル鎖部分の赤外スペクトルに変化が生じることがある。<sup>1, 2</sup>本研究では奇数員金属石鹼であるペラルゴン酸カリウム塩  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{COOK}$  を取り上げヘッドグループの構造の乱れが及ぼす赤外スペクトル変化について検討を行った。

(計算) 計算は古典的な GF 行列法を用いた。COO 基の力の定数は我々がパルミチン酸カリウム塩について求めたものを、 $\text{C}_\alpha\text{H}_2$  基、残りのアルキル基もパルミチン酸カリウム塩について用いたものをそのまま使用した。<sup>3</sup> また、COO 基の回転異性体については力の定数は全トランスと同一とした。<sup>4</sup>

(結果と考察) ペラルゴン酸カリウム塩は室温から 450°C の間に 4 つの相転移点を持つ。室温の相 I で分子鎖は全トランス構造をとる。昇温に伴い相 II でアルキル鎖の部分融解、相 III で液体状のコンホメーションに移る。COO 基に関連するモード、COO 面外変角、COO 横揺れ、COO はさみ、COO 対称伸縮のブロード化が相 II より生じる。<sup>5</sup> 本研究では COO 基のこ

これらのモードの温度変化を全トランス分子でC=O基をC $\alpha$ -C=O軸周りに10°ずつ回転させたモデル、C $\alpha$ -C $\beta$ がゴーシュでC=O基をC $\alpha$ -C=O軸周りに10°ずつ回転させたモデルにつき、基準振動解析を行い、実測赤外スペクトルとの比較検討を行った。その結果C=O対称伸縮以外は概ね100 cm<sup>-1</sup>以上、最大50 cm<sup>-1</sup>程度の振動数シフトが認められたがC=O対称伸縮のみ振動数シフトは生じなかった。このモードはC=O基の回転で遷移双極子モーメントが変化しない。また振動数が高波数にあり他のモードとのカップリングも小さいので別の説明が必要である。

(文献)

1. J. Yano, F. Kaneko, M. Kobayashi, and K. Sato, *J. Phys. Chem.*, B101, 8112 (1997).
2. T. Ishioka, W. Yan, H. L. Strauss, and R. G. Snyder, *Spectrochim. Acta*, A59, 671 (2003).
3. T. Ishioka, S. Murotani, I. Kanesaka, and S. Hayashi, *J. Chem. Phys.*, 103, 1999 (1995).
4. R. G. Snyder, private communication.
5. T. Ishioka, H. Wakisaka, T. Saito, and I. Kanesaka, *Spectrochim. Acta*, A57, 129 (2001).