

# アントラ[1,9-b,c : 4,10-b',c']ジクロメンの電子状態とそのエンドペルオキシド体の構造化学

渡部智博，太刀川達也，北原信孝，時田澄男\*

埼玉大学工学部応用化学科  
〒338 埼玉県浦和市下大久保 255

(Received : , 1996; Accepted for publication : , 1996)

芳香族化合物への一重項酸素の付加反応は，ホトクロミック系への応用の視点から興味深い．しかし，化合物によっては酸素の付加位置を特定することが難しい．本研究では，アントラ[1,9-b,c : 4,10-b',c']ジクロメン (1) の酸素付加体の単結晶を作成し，X線結晶構造解析によって酸素の付加位置を決定した．その結果は，AM 1 ならびに PM 3 分子軌道計算による最高被占軌道 (HOMO) の係数からの予測とも一致した．

Key Words: Photochromism, X-ray crystallography, Anthradichromene, Endoperoxide, Molecular Orbital, Frontier Orbital, HOMO, MOPAC

---

[Abstract in English](#)

[Text in Japanese](#)

---

 [Return](#)