

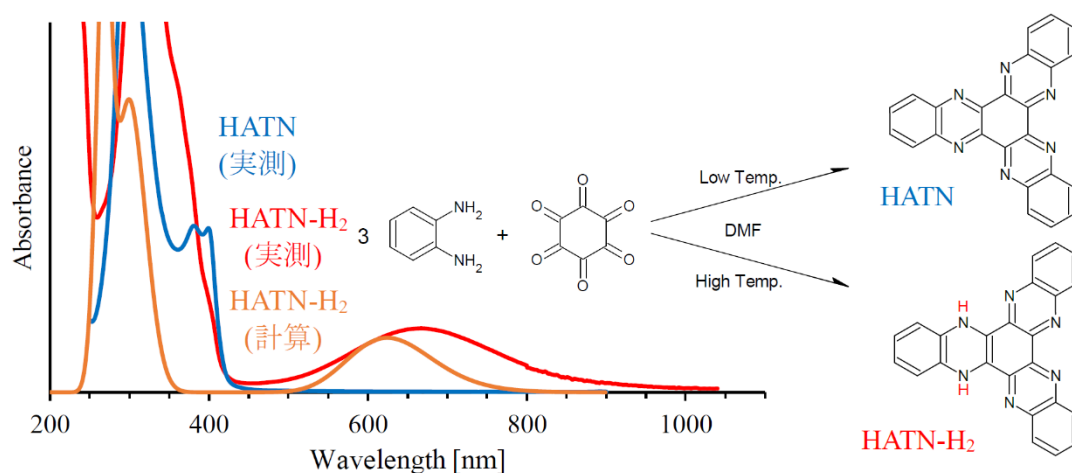
ヘキサアザトリナフチレン還元体の同定と性質

(岡山理大院理¹・茨城大理²) ○大島 貴宏¹・若松 寛¹・藤澤 清史²・東村 秀之¹
 Identification and Property of a Reduced Hexaazatrinaphthylene (¹*Graduate School of Science, Okayama University of Science*, ²*College of Science, Ibaraki University*) ○Takahiro Oshima,¹ Kan Wakamatsu,¹ Kiyoshi Fujisawa,² Hideyuki Higashimura¹

It is known that hexaazatrinaphthylene (HATN) can be synthesized generally by the reaction of hexaketocyclohexane with 1,2-phenylenediamine at 60-120 °C as pale-yellow colored powder, but we have found that the reaction at higher temperature produces the deep-blue product as a single crystal.¹⁾ By comparing the single-crystal structure, FT-IR, and ¹H-NMR analysis of the deep-blue product with DFT calculations, the product was identified as an HATN reductant (HATN-H₂). HATN-H₂ has characteristics of a broad long-wavelength absorption band at 667 nm in solution under Ar in the UV-Vis spectrum. The characteristic would come from the narrow band gap of HATN-H₂, which has two amino groups and four imines. It is also noted that HATN-H₂ is stable in solid-state under air atmosphere, but unstable in solution-state and gradually oxidized to HATN.

Keywords : Hexaazatrinaphthylene; Reductant; Lower energy absorption; DFT calculation

ヘキサアザトリナフチレン (HATN) はヘキサケトシクロヘキサンと 1,2-フェニレンジアミンの 60-120 °C での反応で淡黄色粉末として合成できるが、より高温で反応させると濃青色結晶が得られることを見出している¹⁾。濃青色結晶の単結晶構造、FT-IR、¹H-NMR の分析結果を DFT 計算と比較することで HATN 還元体 (HATN-H₂) であることが判明した。HATN-H₂ はアルゴン下溶液中の UV-Vis で 667 nm に幅広い長波長吸収帯を持つことが特徴であり、2つのアミノ基と4つのイミンをもつため、バンドギャップが狭くなったと考えられる。なお HATN-H₂ は大気中、固体では安定だが、溶液では不安定で徐々に HATN に酸化された。



- 1) 大島貴宏, 世良一真, 中野晟志, 若松寛, 藤澤清史, 田邊洋一, 東村秀之, 日本化学会 第 102 春季年会, P2-1am-11 (2022).