

嵩高いトリフェニルアミンを有するオクタアザテトラセン誘導体の合成と分光学的性質

(芝浦工大工¹・国立研究開発法人物質・材料研究機構²) ○青木 啓太¹・實方 友輝¹・堀 顕子¹・ジョナサン ヒル²・ゲーリー リチャーズ¹ Synthesis and physical properties of octaazatetracene derivatives with bulky triphenylamine (¹*Shibaura Institute of Technology*, ²*National Institute for Materials Science*) ○Keita Aoki,¹ Tomoki Jitsukata,¹ Akiko Hori,¹ Jonathan P. Hill,² Gary J. Richards¹

Pyrazinacenes are a class of heterocyclic acenes containing apical nitrogen atoms. Pyrazinacenes are stable even when the π -conjugated system is extended, and are currently under investigation for a variety of applications. In this study, we synthesized a redox active octaazatetracene derivative appended with four triphenylamines. This compound was identified using various techniques including NMR, mass spectrometry, and X-ray crystallography. The compound exhibits a red color in the reduced state due to absorption around 512 nm and a green color in the oxidized state due to a significant shift in absorption to 850 nm. The absorption and emission spectra of this compound will be discussed as well as its structural characterization by X-ray crystallography.

Keywords : Pyrazinacenes; Near infrared; Redox; Photoluminescence

ピラジナセンは窒素原子を含む複素環式アセンの一種である。アセンに比べて、 π 共役系が伸長しても安定であり、現在、さまざまな応用が検討されている^{1,2)}。本研究では電子供与性の高いトリフェニルアミンが4つ付加したオクタアザテトラセン誘導体 **1** の合成と構造決定を行なった (Figure 1)。塩化オキサリル及びトリフェニルアミンを原料とする4段階合成から **1** を赤色固体で合成した (収率 48%)。この化合物は、各種 NMR 及び質量分析より同定し、CHCl₃ 中での結晶化から単結晶 X 線構造解析にも成功した (Figure 2)。**1** は、還元状態では 512 nm 付近に吸収極大をもつために赤色化合物であり、酸化状態では 850 nm に吸収極大が大きくシフトするために緑色を呈することがわかった。このことから、**1** は電流や電圧によって色が可逆的に変化するエレクトロクロミック特性を持つことが期待できる。当日は、**1** の詳細な構造と分光学的性質について報告する。

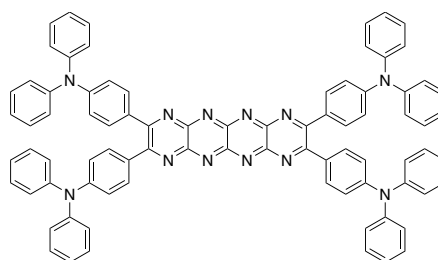


Figure 1. **1** の分子構造

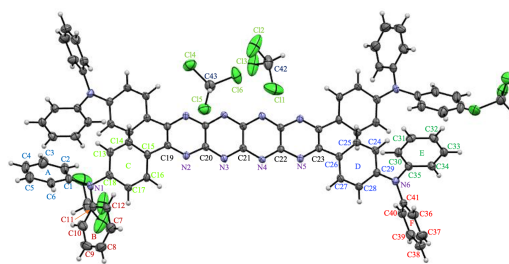


Figure 2. **1** · 4CHCl₃ の結晶構造 **1**

- 1) G. J. Richards, *et. al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, **141**, 19570-19574; 2) G. J. Richards, *et. al.*, *J. Mater. Chem. C*, 2016, **4**, 11514-11523.