

ヘキサアザトリナフチレンの新規結晶構造の合成と物性

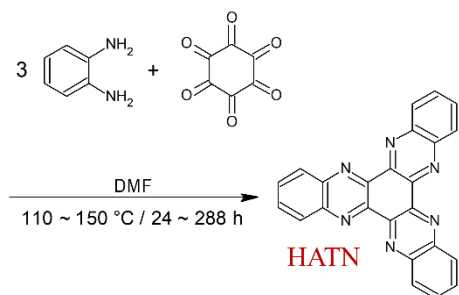
(岡山理大院理¹・岡山理大理²・茨城大理³) ○大島 貴宏¹・世良 一真²・中野 晟志¹・若松 寛^{1,2}・藤澤 清史³・田邊 洋一^{1,2}・東村 秀之^{1,2}

Synthesis and Properties of a New Crystal Structure of Hexaazatrinaphthylene (¹*Graduate School of Science, Okayama University of Science,* ²*Faculty of Science, Okayama University of Science,* ³*College of Science, Ibaraki University*) ○Takahiro Oshima,¹ Kazuma Sera,² Akiyuki Nakano,¹ Kan Wakamatsu,^{1,2} Kiyoshi Fujisawa,³ Yoichi Tanabe,^{1,2} Hideyuki Higashimura^{1,2}

Recently, hexaazatrinaphthylene (HATN) has been applied to organic cathode materials¹⁾ and multinuclear ligand framework.²⁾ As the crystal structure of HATN, only the light yellow structure containing a crystal solvent (HATN-Y) was reported so far. In this work, we somewhat changed the synthetic conditions, and hence obtained a new crystal structure with dark blue color including no solvents at all (HATN-B). Although HATN-Y had an absorption wavelength up to ~600 nm, it was surprising that HATN-B possessed a wide range of absorption wavelength up to near infrared region of ~1400 nm. We will report the detailed results of synthesis, analysis, and calculation of HATN-B.

Keywords : Hexaazatrinaphthylene; Crystalline structure; Crystal solvent; Near infrared absorption

近年、ヘキサアザトリナフチレン(HATN)は、多電子を受容可能な有機正極材料¹⁾や酸素還元により有利な多核金属錯体の中心骨格²⁾などに用いられている。HATNの結晶構造としては、これまで結晶溶媒を含む淡黄色構造(HATN-Y)のみが報告されていた¹⁾。今回、合成条件を少し変更しただけで、結晶溶媒を全く含まない新規の濃青色構造(HATN-B)が得られた。HATN-Yでは約600 nmまでしか吸収を持たなかったが、HATN-Bは驚くべきことに約1400 nmと近赤外領域まで、幅広い吸収を持つことを見出した。本発表では、HATN-Bの合成条件検討や分析・計算の結果を詳細に報告する。



Scheme 1 HATN合成スキーム

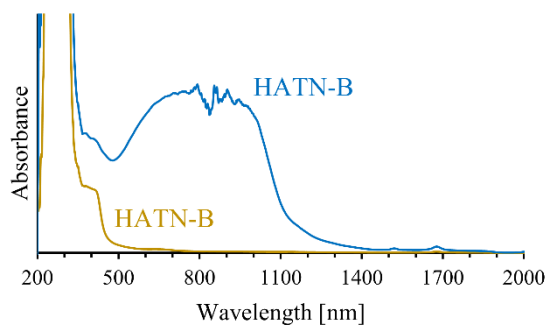


Fig.1 各生成物の反射UV-Visスペクトル

- 1) C. Peng, G.-H. Ning, J. Su, G. Zhong, W. Tang, B. Tian, C. Su, D. Yu, L. Zu, J. Yang, M.-F. Ng, Y.-S. Hu, Y. Yang, M. Armand, and K. P. Loh, *Nature Eng.*, **2017**, 2, 17074.
- 2) R. Liu, C. von Malotki, L. Arnold, N. Koshino, H. Higashimura, M. Baumgarten, and K. Müllen, *J. Am. Chem. Soc.*, **2011**, 133, 10372.