

2-(*p*-ベンゾキノニル)ベンゾチアゾール誘導体の合成と構造および物性

(東北大院工¹・信州大理²・東北大多元研³・公立千歳科学技術大⁴) ○對馬 敏高¹・武田 貴志²・出倉 駿^{1,3}・坂井 賢一⁴・芥川 智行^{1,3}

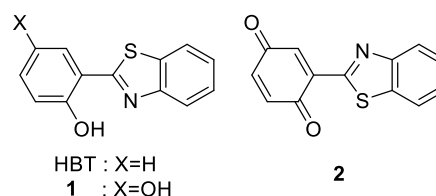
Syntheses, Structures and Physical Properties of 2-(*p*-benzoquinonyl)Benzothiazol Derivatives (¹*Graduate School of Engineering, Tohoku University*, ²*Faculty of Shinshu University*, ³*IMRAM Tohoku University*, ⁴*Chitose Institute of Science and Technology*) ○Toshitaka Tsushima,¹ Takashi Takeda,² Shun Dekura,^{1,3} Ken-ichi Sakai,⁴ Tomoyuki Akutagawa^{1,3}

2-(2'-Hydroxyphenyl)benzothiazole (HBT) shows the excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) fluorescence. Previously, we had reported the HBT derivative **1** and its charge-transfer (CT) complexes with *p*-benzoquinone (BQ). Herein, we synthesized the HBT derivative with BQ moiety (**2**), which electronic structure, optical properties, and crystal structure were evaluated.

Keywords : *p*-benzoquinone; Quinhydrone; Benzothiazol

2-(2'-ヒドロキシフェニル)ベンゾチアゾール (HBT) は、大きなストークスシフトを有する特徴的な励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) 型発光を示す¹⁾。我々は、これまでにハイドロキノン部位を有する HBT 誘導体 **1** を合成し、*p*-ベンゾキノン (BQ) およびテトラシアノキノジメタン (TCNQ) との電荷移動錯体を作製し、その結晶構造を報告している²⁾。本研究では、キンヒドロン型錯体の形成を目的とし、**1** を酸化した BQ 誘導体 **2** を新規に合成し、その構造と物性を評価したので報告する (Scheme 1)。

DMF 溶液中で **2** および BQ の CV 測定を行った (Fig. 1)。**2** は BQ とは異なり 3 段階の可逆な酸化還元挙動を示し、BQ より高電位側に還元ピークが観測された。従って、**2** は BQ より電子アクセプター性が向上していることが示唆された。このことは、理論計算からも支持され、**1** との電荷移動錯体の形成が期待できる。当日は、**1** と **2** の電荷移動錯体についても報告する。



Scheme 1 分子 **1** と **2** の分子構造

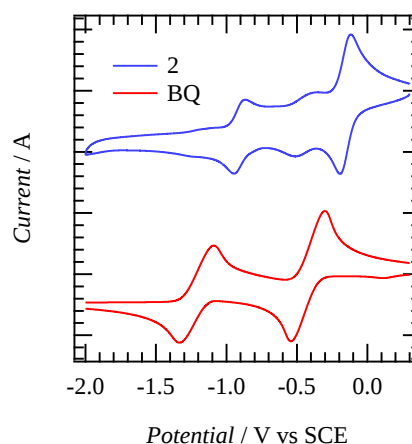


Fig. 1 分子 **2** および BQ の CV チャート (in DMF vs SCE)

1) A. Heller, *et al*, *J. Phys. Chem.*, **1970**, 74, 4473-4480.

2) 對馬敏高, 第 17 回分子科学討論会, 2023