トリアゾール骨格を有する水素結合型 *p*-ベンゾキノン誘導体の合成、構造及び物性

（東北大工[1]・東北大院工[2]・東北大多元研[3]）○原田史織[1]・出倉駿[2,3]・芥川智行[2,3]
Synthesis, Structures, and Physical Properties of Hydrogen-bonded *p*-Benzoquinone Derivatives with Triazole Unit ([1]*School of Engineering, Tohoku University*, [2]*Graduate School of Engineering, Tohoku University,* [3]*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University*) ○Shiori Harada,[1] Shun Dekura,[2,3] Tomoyuki Akutagawa[2,3]

In recent years, Interesting multi- or coupled-functions derived from the combination of degrees of freedom for π-electrons and protons has attracted much attention.[1] In this study, we synthesized bistriazole-*p*-benzoquinone (**H_2BTBQ**),[2] where electron accepting *p*-benzoquinone is fused with triazole possessing proton tautomerism and electron-withdrawing property. The crystal structure and physical properties of **H_2BTBQ**, anion, and dianion salts of **NaHBTBQ** and **Na_2BTBQ** were investigated in solid state. The crystals of **H_2BTBQ**, **NaHBTBQ**·2H_2O, and **Na_2BTBQ**·4H_2O were identified. Among these, the hydrate crystals can adsorb and desorb H_2O molecules reversibly, which was confirmed by H_2O sorption isotherm at 293 K. The dielectric properties of these compounds are also discussed.
Keywords : Triazole, p-Benzoquinone, Hydrogen-bond, Water sorption

π電子系とプロトンの自由度が相関した系では興味深い多重機能や相関物性の発現が期待される[1]。筆者らは、電子受容性の*p*-ベンゾキノンに電子求引性と水素結合性を持つトリアゾールを縮環した **H_2BTBQ** の結晶構造と溶液中の酸化還元特性を報告したが[2]、**H_2BTBQ** の固体物性は未開拓であった。本研究では、**H_2BTBQ** に加え、そのナトリウム塩である **NaHBTBQ** および **Na_2BTBQ** を合成し、固体状態における構造および物性を評価した（Fig. 1）。

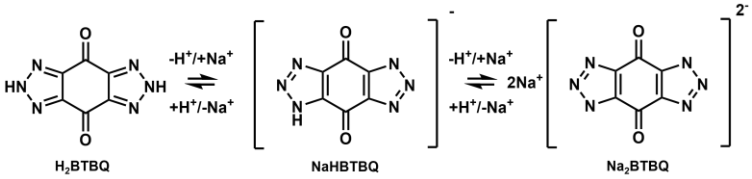

Fig. 1 本研究で対象とした化合物

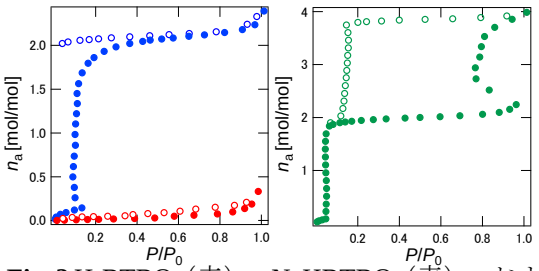

Fig. 2 H_2BTBQ（赤）、NaHBTBQ（青）、およびNa_2BTBQ（緑）の293 Kにおける水蒸気吸着等温線（closed: 吸着過程、open: 脱着過程）

元素分析から、**H_2BTBQ**、**NaHBTBQ**·2H_2O、**Na_2BTBQ**·4H_2O の組成の結晶が得られることが明らかになった。熱重量分析では、水和結晶は、いずれも H_2O の脱離後の無水結晶が安定に存在することが確認された。各結晶の水蒸気吸着等温線を 293 K で測定したところ、**H_2BTBQ** は水を吸着しなかった一方で、**NaHBTBQ** および **Na_2BTBQ** は可逆に二水和物および四水和物となることが示された（Fig. 2）。当日は、これらの H_2O 吸着挙動の相違を結晶構造から議論するとともに、誘電特性についても議論を行う。

[1] H. Mori *et al.*, *Chem. Commun*., **2022**, *58*, 5668. [2] M. Sato *et al.*, *CrystEngComm*, **2017**, *19*, 910.

© The Chemical Society of Japan