

アザクリセン化合物群の電子特性

(市立山口東理大¹⁾ ○濱本 信次¹・井口 眞¹

Electronic Properties of Azachrysene Compounds (¹*Department of Applied Chemistry, Faculty of Engineering, Sanyo-Onoda City University*)○Nobutsugu Hamamoto,¹ Makoto Inokuchi

Chrysene has a minimum framework of phenacene-type polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) belonging to C_{2h} point group according to the molecular symmetry. Azachrysene compounds, where a carbon atom of chrysene is replaced by a nitrogen one, show different electronic properties depending on the position of nitrogen atom. In this study, we systematically examined an effect of a nitrogen atom on electronic properties, notably a molecular orbital energy diagram and a UV-Vis spectrum for a series of azachrysene compounds by theoretical calculations and experimental observations.

Keywords : Aromatic compound; Quantum chemical calculation; UV-Vis spectrum

フェナセン型の多環式芳香族炭化水素 (PAHs) は、分子構造の対称性によって2種類 (C_{2v} と C_{2h}) に分類される。先行研究において、 C_{2v} 対称性に属する PAHs の最小骨格化合物である phenanthrene に着目し、その類縁体である窒素原子が1つ導入された azaphenanthrene において、窒素原子の導入位置による電子物性、特に分子軌道と紫外可視吸収スペクトルの違いを明らかにした¹⁾。本研究では、 C_{2h} 対称性に属する PAHs の最小骨格化合物である chrysene に窒素原子が導入された azachrysene の電子物性に関する窒素原子位置依存性を実験・理論の両面から系統的に明確にすることを目的とした。

1-azachrysene の紫外可視吸収スペクトルの実験・計算結果、及び chrysene の計算結果を Figure 1 に示す。chrysene を含むフェナセン型 PAHs の第一励起 (S_1) 及び第二励起 (S_2) 状態は Platt の記法で L_b 及び L_a と表記され、これら励起状態への電子遷移に伴う振動子強度は前者の方が小さい²⁾。これに対して、1-azachrysene では、 S_1 状態の電子遷移に伴う振動子強度が S_2 状態のそれより大きい計算結果を得た。azaphenanthrene では、窒素原子導入に伴い、 S_1 及び S_2 状態に主に関与する分子軌道の形状に大きな変化が生じていた¹⁾が、1-azachrysene では比較的小さな変化しか生じていなかった。電子物性の詳細、及びその他の azachrysene の結果については当日報告する。

- 1) N. Hamamoto *et al.*, *Phys. Chem.* **2022**, 552, 111370.
- 2) M. Baba *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **2013**, 117, 13524.

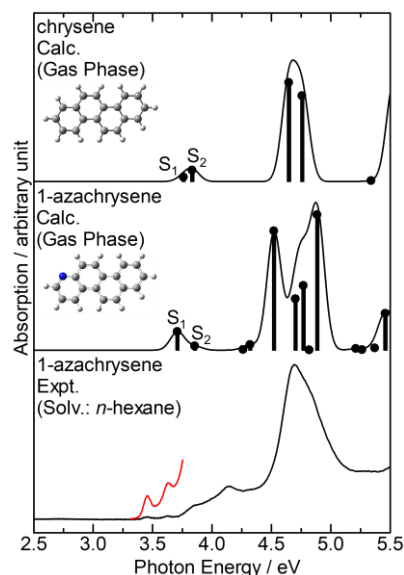


Figure 1. Excited states of chrysene and 1-azachrysene as obtained from the TD-B3PW91 calculations. The experimental absorption spectrum of 1-azachrysene is shown in the bottom panel.