8 位にエーテル結合を有するキノフタロン化合物の結晶構造

（千葉大工[1]・千葉大院工[2]・トーヨーカラー株式会社[3]）○中村 建斗[1]・長谷川 怜勇[2]・赤染 元浩[2]・伊藤 理人[3]・三上 譲司[3]・矢内 宏幸[3]・松本 祥治[2]
Crystal Structures of Quinophthalone Compounds with an Ether Bond at 8 Position ([1]*Faculty of Engineering, Chiba University*, [2]*Graduate School of Engineering, Chiba University*, [3]*TOYOCOLOR CO., LTD.*) ○Kento Nakamura,[1] Reo Hasegawa,[2] Motohiro Akazome,[2] Rihito Ito,[3] Joji Mikami,[3] Hiroyuki Yanai,[3] Shoji Matsumoto[2]

Quinophthalone compounds have long played an important role as dyes and pigments because of their bright yellow color. However, the reports about their crystal structures are very rare.[1~3] In this study, we report the crystal structures of quinophthalone compounds with an ether bond at 8 position. All quinophthalone moiety showed NH-type tautomer and we found to be highly planer structurer with NH···O intramolecular hydorogen bonds. π-Stack was also found in all crystal structures. But the stacking mode were different from the parallel (**1b**) and the anti-parallel (**1a**, **1c** and **1d**) motifs. In addition, we found that the distance between the π-stacks was shortest in **1a**.
Keywords : Quinophthalone; Ether Bond; Crystal Structure; Tautomerism; π-Stack Structure

キノフタロン化合物は鮮明な黄色を呈するため古くから染料や顔料として重要な役割を担っており，今まで数多くの類似化合物が合成されてきた。しかし，その結晶構造に関する報告はほとんどされていない[1~3]。本研究では，8 位にエーテル結合を持つキノフタロン化合物(**1a~1d**)の結晶構造を明らかにした。**1a~1d** はいずれも NH 型の互変異性体であり，インダンジオン部位やエーテルとの NH···O 分子内水素結合を形成し，高い平面性を有していることが明らかとなった。さらに，いずれの結晶構造でも，キノフタロン骨格は π-スタック構造を形成していたが，**1b** は順平行，その他の **1a**, **1c**, **1d** は逆平行といった違いが見られた。また，π-スタック間の距離は **1a** が最も短くなっていた。

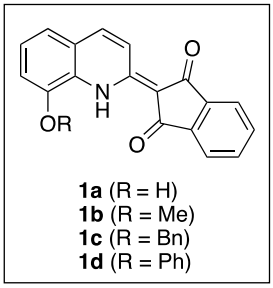

Table 1. The difference of π -stack

compound	stacking mode	π-stack distance [Å]
1a	anti-parallel	3.217, 3.363
1b	parallel	3.380
1c	anti-parallel	3.350, 3.371, 3.388
1d	anti-parallel	3.368, 3.409

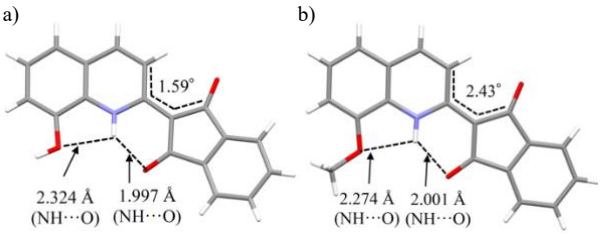

Figure 1. Single crystal structures of a) **1a** and b) **1b**.

1) I. Fujii, T. Kodama, N. Yanagihara, N. Hirayama, *Anal. Sci.* **2004**, *20*, x35.
2) S. D. Gumbert, M. Körbitzer, E. Alig, M. U. Schmidt, M. R. Chierotti, R. Gobetto, X. Li, J. van de Streek, *Dyes Pigm.* **2016**, *131*, 364.
3) B. Ding, Y. Jiang, Y. Zhang, R. Ye, J. Sun, C. Yan, *Chinese J. Org. Chem*. **2020**, *40*, 1003.

© The Chemical Society of Japan