

トリアゾール縮環 *p*-ベンゾキノンの結晶構造、水吸着挙動及び誘電特性における H^+/Na^+ 置換効果

(東北大院工¹・東北大多元研²) ○原田史織¹・出倉駿^{1,2}・佐藤鉄^{1,2}・芥川智行^{1,2}

Effects of H^+/Na^+ substitution on the crystal structures, water sorption behaviors, and dielectric properties of triazole-fused *p*-benzoquinone (¹Graduate School of Engineering, Tohoku University, ²Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University) ○Shiori Harada,¹ Shun Dekura,^{1,2} Tetsu Sato,^{1,2} Tomoyuki Akutagawa^{1,2}

In recent years, the developments of new functional materials utilizing systems with both π -electron system and hydrogen bonding abilities. In particular, alkali-metal salts of π -planar hydrogen-bonding molecules are expected to exhibit stable and reversible functionality switching in response to water sorption. In this study, we focused on triazole-fused *p*-benzoquinone, which possesses multiple mobile protons, and investigated the effects of H^+/Na^+ substitution effects on the solid-state properties. The crystals of H_2BTBQ , $\text{NaHBTBQ} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, and $\text{Na}_2\text{BTBQ} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ were identified. Among these, the hydrate crystals can adsorb and desorb H_2O molecules reversibly, which was confirmed by H_2O sorption isotherms at 293 K. The dielectric properties of these compounds are also discussed.

Keywords : Triazole, *p*-Benzoquinone, Electron Acceptor, Hydrogen-bond

近年、 π 電子系と水素結合を併せ持つ新機能性材料の開拓が注目されている^[1]。その中で、平板状の水素結合型 π 共役分子のアルカリ金属塩では、可逆な水吸着に伴う物性スイッチングが期待できる^[2]。筆者らは、自由に脱着可能なプロトンを複数有するトリアゾール縮環 *p*-ベンゾキノ (H_2BTBQ) に着目し、その結晶構造と溶液中の酸化還元特性を報告したが^[3]、固体物性は未開拓であった。本研究では、 H_2BTBQ に加え、その H^+/Na^+ 置換体である 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)。

元素分析から、各組成は H_2BTBQ 、 $\text{NaHBTBQ} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{Na}_2\text{BTBQ} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ であることが明らかになった。各結晶の水蒸気吸着等温線を 298 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、 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] H. Abe *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interface*, **2020**, 12, 37391. [3] M. Sato *et al.*, *CrystEngComm*, **2017**, 19, 910.

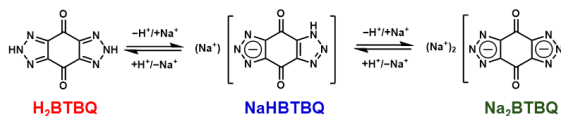


Fig. 1 本研究で対象とした化合物

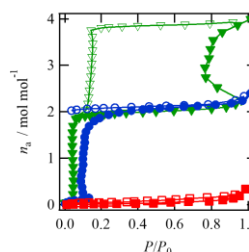


Fig. 2 H_2BTBQ (赤)、 NaHBTBQ (青)、および Na_2BTBQ (緑) の 298 K における水蒸気吸着等温線 (closed: 吸着過程、open: 脱着過程)