

〔Chem. Pharm. Bull., 30, 708 (1982)〕

〔薬品物理化学教室〕

Physicochemical Study on Leuco Triarylmethane Dyes; Photolytic Coloration of 4, 4-Diaryl-3, 4-dihydro-1(2H)-phthalazinonesMASAYUKI KUZUYA, TAMOTSU USUI, FUMIO MIYAKE,
TAKACHIYO OKUDA

ロイコトリアリルメタン系色素類の物理化学的研究； 4, 4-Diaryl-3, 4-dihydro-1(2H)-phthalazinone 類の光呈色について

葛谷昌之, 臼居 保, 三宅二三夫, 奥田高千代

ロイコトリアリルメタン系色素の一つである 4,4-diaryl-3,4-dihydro-1(2H)-phthalazinone のジクロロメタン溶液は、紫外線照射によって非常に速やかに光呈色した。しかしながら、この光呈色はロイコ色素の消滅と色素生成の電子スペクトルによる経時的变化における溶媒効果を検討した結果、5%エタノール-ジクロロメタン溶媒で最も効率よく進行することを見出した。この事実は蛍光スペクトルの溶媒依存性等の検討結果を併せ考えると、エタノールの増加は光イオン化を促進するが溶媒の攻撃によってエトキシ-ロイコ体への逆過程も促進され見かけの色素生成は抑制される結果によることが示唆された。

以上の結果をもとに表題化合物が示す光呈色過程はトリアリルメタン色素カチオン生成を伴う光イオン化であることを提案した。

〔Chem. Pharm. Bull., 30, 1980 (1982)〕

〔薬品物理化学教室〕

Molecular Orbital Calculations for Azaquinonoid-Ketene and Analysis of the Intramolecular Cycloaddition with the N, N-Dimethylanilino Group

MASAYUKI KUZUYA, SEIJI ITO, FUMIO MIYAKE, TAKACHIYO OKUDA

Azaquinonoid-Ketene の分子軌道計算とそのN, N-Dimethylanilino 基との分子内閉環の解析

葛谷昌之, 伊藤誠二, 三宅二三夫, 奥田高千代

以前、quinonoid-ketene が dimethylaniline 環と配向特異的に〔 $\pi 4a + \pi 2a$ 〕分子内閉環を容易に行なうことを報告した。本報告では benzotriazinone 体から発生させた azaquinonoid-ketene の同様の分子内閉環挙動を検討した。その結果、azaquinonoid-ketene は dimethylaniline 環との分子内閉環によって antarafacial 型の閉環から予想される acridone 体を与えなかった。しかしながら、モデル化合物における分子軌道計算による電子構造および 4π -component と 2π -component の安定 conformation の構造は quinonoid-ketene と同様に antarafacial 型閉環が有利であることを示唆した。これらの結果より、aza-analog においても "concealed process" として〔 $\pi 4a + \pi 2a$ 〕型の分子内閉環が進行するものの、その後続く最終 acridone 生成物への開環過程において分解様式が異なる結果であることを提案した。