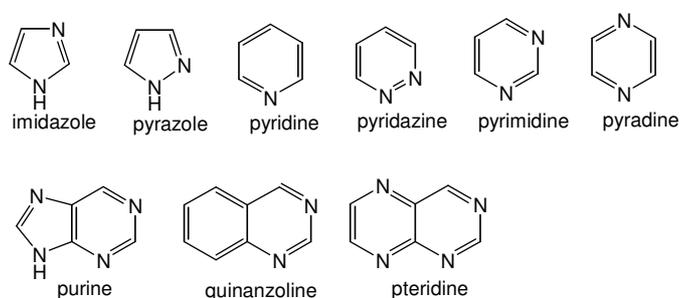


4250. ヘテロ芳香環の官能基としての性質

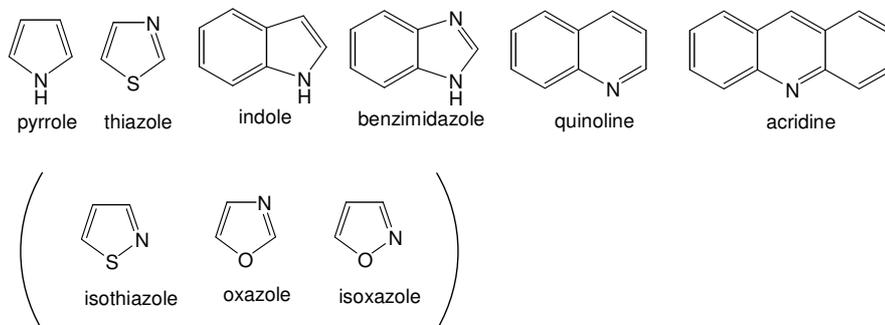
ヘテロ芳香族化合物は水溶性のものが多いです。それらの水溶性に関する決まった規則はありませんが N 原子を含む場合、特に N 原子の孤立電子対が sp^2 を占める場合水溶性が増します。つまり、 $=N-$ の部分構造を持つヘテロ環芳香族化合物は水に溶けやすくなります。ただし、炭化水素と縮合したもの (quiloline, acridiene, isoquinoline など) は親水性部分に対する疎水性部分の表面積が大きくなるため、水に溶解しにくくなります。

$=N-$ の部分構造を持つすべてのヘテロ環芳香族化合物は、希塩酸には溶けます。これは、N 原子の非結合電子対にプロトンが付き、 $=N^+H-$ となり溶媒の H_2O 分子と水素結合するためです。図 1 に複素環式芳香族化合物の水溶性の難易に関してまとめたものを示します。

水によく溶けるもの



水に少し溶けるもの



水にほとんどあるいは全く溶けないもの

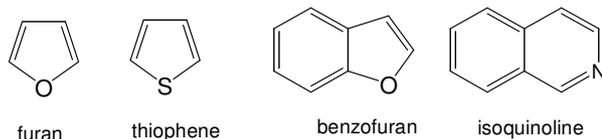


図 1. 複素環式芳香族化合物を水溶性の観点から分類する (かっこ内は推定)。例外的に、イソキノリンは $-C=N-$ の構造を持ちますが、水には難溶性です。

複素環式芳香族化合物の骨格は化学的に安定ですので分子の骨格として扱われることが

多いです。

=N-の構造を持つもの（ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、キノリンなど）は水に溶け塩基性を示し、希塩酸に容易に溶解します。=N-の孤立電子対は π 電子系とは直交している sp^2 混成軌道に入り、芳香族性とは関係ありません。

一方、5員環のピロール、チアゾール、インドールの N 原子の孤立電子対は p 軌道に入り、 π 共役系に取り込まれ 6π 系の芳香族安定性を形成します。ピリジンのような塩基性の性質はありません（水にも、希塩酸にも溶解しない（ピロールは希塩酸で分解する））。N-H の H は H^+ として放出されやすく、酸性の性質を示します（ピロールの $pK_a=17.5$ 、参考：通常第二級アミンの pK_a 値は約 35 です）。