

3G208

反強誘電性液晶物質の結晶構造解析

(お茶大・理) 川原 純恵・○堀 佳也子

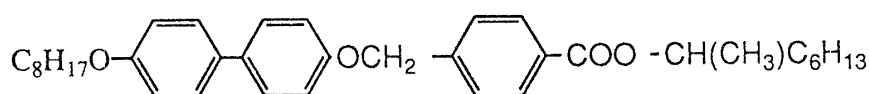
Crystal structures of antiferroelectric Mesogens.

Sumie Kawahara and Kayako Hori

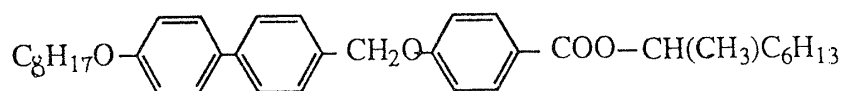
Department of Chemistry, Ochanomizu University,

Otsuka, Bunkyo-ku, Tokyo 112

MHP OBC (4-[(R or S)-1-methylheptyloxycarbonyl]phenyl 4'-octyloxybiphenyl-4-carboxylate)を初めとして反強誘電性液晶相を示す多数の物質が合成されている。我々は、この相をもたらす分子間力を解明する目的で、MHP OBC¹⁾ および、そのキラル基の鎖長の異なる同族列²⁾ について、単結晶によるX線構造解析を行ってきた。その結果、いずれも、キラル基の直鎖が分子の長軸に対してほぼ垂直に折れ曲がった分子がほとんど同じパッキングをとっており、鎖長により反強誘電相が発現したりしなかったりする現象は、結晶構造には反映していない。この理由として、層の積み重なり方によって生ずる反強誘電相と強誘電相のエネルギー差がきわめて小さいこと、室温で存在する結晶構造と当該液晶の間にはいくつかの相が介在することが挙げられる。しかし、鎖長に関わらず、同様の構造をとることは、1-メチルヘプチルオキシカルボニル基に固有な構造として注目される。そこで、今回は以下の物質について結晶構造解析を試みた。



1

Crystal \rightarrow S₄ \rightarrow S₃ \rightarrow Sc_A* \rightarrow Sc* \rightarrow Liquid

2

Cryst \rightarrow S \rightarrow Sc_A* \rightarrow Sc* \rightarrow S_A \rightarrow Liquid

かわはら 純恵 堀 佳也子

ここで 1 の物質は S_A 相を経ずに等方相に転移する点で、特徴的である³⁾。結晶は酢酸エチル-1-ブタノールから板状晶として得た。回折強度は $CuK\alpha$ 線を用い $AF C-7R$ 4 軸回折計により測定した。

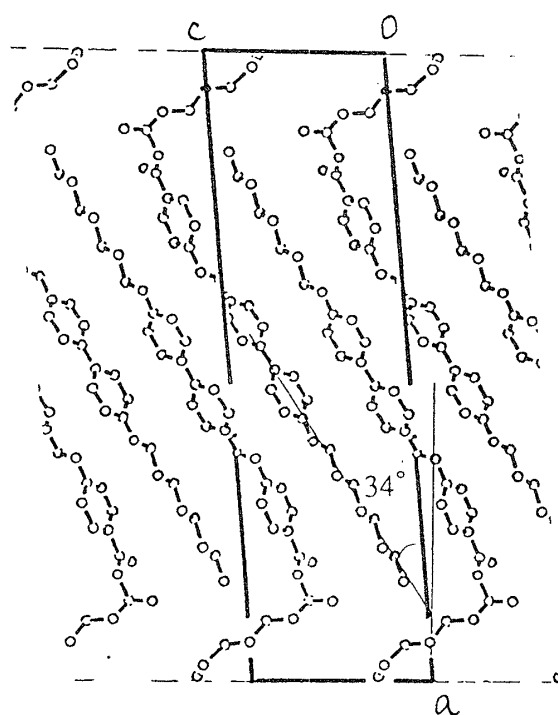
結晶学データ；空間群 $P2_1$, $a=33.132(5)$, $b=5.512(2)$, $c=9.069(5)\text{\AA}$, $\beta=95.49^\circ$, $V=1648\text{\AA}^3$, $Z=2$, $d_x=1.097$. 現在の R 値は、 $I > 3\sigma(I)$ を満たす 1536 個の反射に対して 0.10 である。

分子

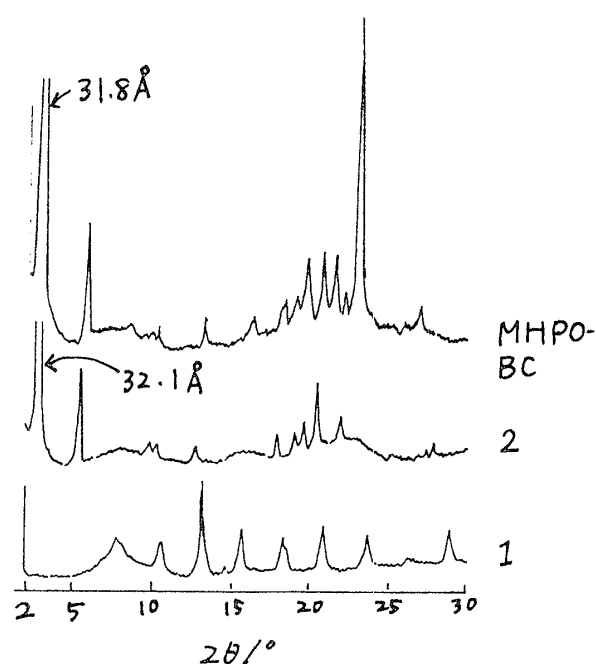
図示するように、この結晶も MHP O B C 類似の構造およびパッキング様式をとっている。しかし、示差走査熱量測定では提供されたままの粉末と単結晶では異なる挙動を示し、かつ前者の粉末 X 線回折パターンは、明らかにこの構造を再現しない。おそらく多形現象が存在するものと思われる。他方 2 についてはまだよい結晶が得られないが、粉末回折パターンは、MHP O B C の場合と比較的似ており、一連の化合物と共通の構造をとるものと推定される。

試料を提供いただいたチッソ石油化学に感謝申し上げます。

1 の結晶構造図



X 線回折パターン



- 1) K. Hori and K. Endo, Bull. Chem. Soc. Jpn., 66, 46 (1993).
- 2) K. Hori, S. Kawahara and K. Ito, Ferroelectrics, 147, 91 (1994).
- 3) M. Neundorf, S. Diele, S. Saito, D. Demus, T. Inukai and K. Murashiro, Abstract of 4th International Conference on Ferroelectric Liquid Crystals (1993), P21.