

1K110

強誘電性液晶形成物質の結晶構造 (7) 4'-オクチル-4-ビフェニル  
4-[(S)-1-メチルヘプチルオキシ]ベンゾエート

(お茶女大理・東工大理) ○堀 佳也子・大橋 裕二

Crystal Structures of Chiral Smectogens (7) 4'-Octyl-4-biphenyl 4-[(S)-1-Methylheptyloxy]benzoate.

Kayako Hori and Yuji Ohashi

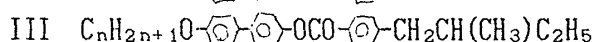
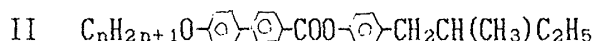
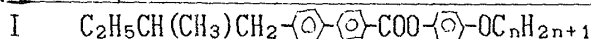
Department of Chemistry, Ochanomizu University, Otsuka, Bunkyo-ku, Tokyo 112 and Department of Chemistry, Tokyo Institute of Technology, O-okayama, Meguro-ku, Tokyo 152.

強誘電性液晶における分子間相互作用を解明するために我々は単結晶によるX線構造解析を行い、結晶構造と液晶挙動の関連をみいだそうとしている。既に、2-メチルブチル基を不斉部とする一連の化合物について結晶構造と液晶挙動がよい相関をもつことを明らかにしてきた(表1)。<sup>1-4)</sup> さらに、異性体によって異なる液晶相系列をとることが知られている<sup>5)</sup> 1-メチルヘプチルオキシ基を不斉部とする化合物について結晶構造解析を行っている。今回、標題の化合物について構造解析を行い、既に解析済の4-オクチルフェニル 4'-[(S)-1-メチルヘプチルオキシ]ビフェニル-4-カルボキシレート<sup>6)</sup> および2-メチルブチル基を不斉部とする化合物についての結果と比較検討を行った。

[実験] 構造解析用の単結晶はエーテル/メタノール混合溶媒より成長させた。解析はSHELX-86,<sup>7)</sup> 精密化はSHELX76<sup>8)</sup> によって行った。結晶学データ: C<sub>2</sub>, a=44.09(1),

表1. 2-メチルブチル基を不斉部とする結晶の特徴

	n	paraffin chain	biphenyl link	tilt angle	overlapping	polar group association	phase sequence	ref.
I	5	all-trans	coplanar	50°	small	ester-ester	X-(C*)-N*	(1)
	7	extended	53°	60°	small	ester-ester	X-C*-N*	(1)
II	7	twisted	coplanar	30°	large	ester-ether	X-C*-A-N*	(2)
	8	twisted	coplanar	30°	large	ester-ether	X-C*-A-N*	(2)
III	6M	all-trans	coplanar	60°	small	ester-ester	X-X'-I*-C*-N*	(4)
	6T	twisted	20, 40°	45°	large	ester-ether	X-X'-I*-C*-N*	(4)
	7M	twisted	coplanar	45°	large	ester-ether	X-I*-C*-N*	(3)
	7T	extended				ester-ester		
		isomorphous with 6T					X-J*-I*-C*-N*	(3)

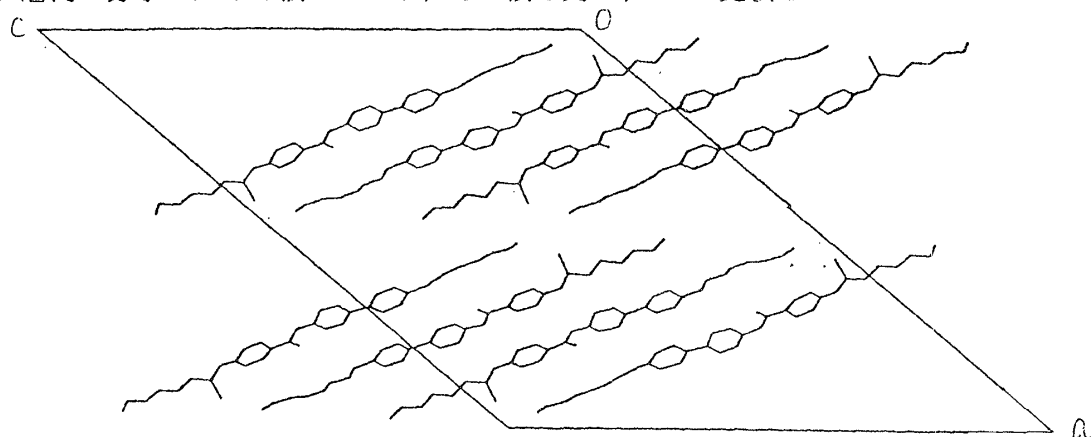


X, X' denote crystals.

ほり かやこ・ おおしゆうじ

$b=5.494(3)$ ,  $c=39.52(2)$  Å,  $\beta=139.02(1)^\circ$ ,  $V=6278(4)$  Å<sup>3</sup>,  $Z=8$ . 現在のR値は 2251個の反射に対して 0.109 である.

[結果と考察] 図1に結晶構造を示す. 結晶学的に独立な2分子が対をなして層状構造を形成している. 層内で分子は大きく傾いており, その傾き角は, 60°と見積もれる.



分子構造の特徴はビフェニル部は共平面をなし, パラフィン鎖は直鎖部, 不斉部ともに伸びきった構造をとっており, 層間で接触している. この特徴は2-メチルブチル基を不斉部とする系列Iの結晶構造の特徴と類似しておりこの化合物が結晶-Sm\**C*-chol-isoという相系列をとることとよい対応を示している. 他方, 結晶-Sm\**C*-chol-isoという相系列をとる4-オクチルフェニル 4'-[(S)-1-メチルヘプチルオキシ]ビフェニル-4-カルボキシレートの結晶構造においては, 独立な分子が一個で, らせん軸によって関係づけられていること, 不斉部の鎖状部分がねじれて層内の分子の重なりに寄与し, 重なりが大きく傾き角が小さいことなど, 同じ相転移経路をとる系列IIと共通の特徴を示す. 相違点は, 伸びきった直鎖部が層間で接触しており系列Iと類似の様相を示すことであるが, C-C距離は4.4 Å 以上と比較的長く分子間相互作用への寄与は小さいと考えられる. 1-メチルヘプチルオキシ基をもつ化合物においても2-メチルブチル基を不斉部とする場合と同様, 液晶挙動をよく反映した結晶構造をとることが明らかになった.

試料を提供していただいたチツソ (株) の犬飼孝・古川顕治両博士に感謝します.

#### 文献

- 1) K.Hori and Y.Ohashi, Bull.Chem.Soc.Jpn., 61, 3859 (1988).
- 2) K.Hori, M.Takamatsu and Y.Ohashi, Bull.Chem.Soc.Jpn., 62, 1751 (1989).
- 3) K.Hori and Y.Ohashi, Bull.Chem.Soc.Jpn., 62, 3216 (1989).
- 4) K.Hori and Y.Ohashi, Liq. Cryst., submitted.
- 5) T.Inukai, S.Saitoh, H.Inoue, K.Miyazawa, K.Terashima, and K. Furukawa, Mol. Cryst.Liq.Cryst., 141,251 (1986).
- 6) 堀,大橋,第58日化年会(1989).
- 7) G.M.Sheldrick, SHELX86. Program for crystal structure determination. Univ. of Gottingen, Federal Republic of Germany (1986).
- 8) G.M.Sheldrick, SHELX76. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England (1976).