

2PB03

Perfluorooctyl 基を持つ液晶性物質の結晶構造と液晶挙動の関連

(お茶大院・山口大工*) ○矢野 恵・堀 佳也子・岡本 浩明*・竹中 俊介*

Relationships between crystal structures and liquid crystalline behavior of mesogens having a perfluorooctyl group

Megumi Yano, Kayako Hori, Hiroaki Okamoto* and Shunsuke Takenaka* (Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University, *Faculty of Engineering, Yamaguchi University)

In order to study the influence of carbon numbers of alkyl chains on liquid crystalline behavior and crystal structures, crystal structures have been determined for alkyl 4-[2-(perfluorooctyl)ethoxy]benzoates, which show uncommon liquid crystalline features: lower ($n=1\sim 5$) and higher members ($n\geq 11$) show monotropic smectic A phases while middle members do not. The crystal structures of middle members ($n=6,7$) are different from that of a lower member ($n=2$). In the former, the perfluorooctyl group and the alkyl chain are alternately arranged while in the latter perfluorooctyl chains aggregate. It is suggested that fluorophilic interaction has an influence on the appearance of liquid crystalline phases.

〈序論〉

Perfluorooctyl 基を持つ以下の同族列は $n=1\sim 5$ と $n\geq 11$ の二つの領域にモノトロピックの S_A 相を発現するが、 $n=6\sim 10$ では発現しないという珍しい特徴を持つ¹⁾。本研究では、この液晶挙動をアルキル鎖長の違いによるパッキングへの影響と、また、フッ素による相互作用を X 線結晶構造解析によって調べることを目的としている。以前に解析がなされた液晶相を発現する $n=2$ ²⁾ に加えて、今回液晶相を発現しない $n=6,7$ についての結晶構造解析を行ったので報告する。



Alkyl 4-[2-(Perfluorooctyl)ethoxy]benzoates

〈実験〉

ジクロロメタン／エタノール溶液から板状晶を得た。回折データは CuK α 線を用いて 200K において測定した。結晶学データおよび最終 R 値を Table.1 に示す。

〈結果〉 液晶相を発現しない $n=6,7$ の結晶構造

には類似性が見られた。これまでの研究からフッ素化された炭素鎖どうしは、フッ素原子の高い電気陰性度に由来する分子間力によって集まることが予想されていたが、これらの物質は隣接する分子が互いに逆平行に配列した構造をとっており、フッ素同士の相互作用は見られなかった。Fig. 1 に $n=6,7$ と以前に解析がなされた $n=2$ の結晶構造を示す。液晶相を発現する $n=2$ とは、結晶構造に顕著な違いが見られる。フッ素化された炭素鎖どうしが集まるように配列している $n=2$ では、フッ素同士の Fluorophilic 相互作用が働いていると考えられるが、一方 $n=6,7$ ではそのような効果は見られない。この結果より、液晶相の発現には Fluorophilic 相互作用が大きく関与していることが示唆される。

- 1) H. Okamoto, H. Murai, and S. Takenaka.
Bull. Chem. Soc. Jpn. 70, 3163-3166 (1997)
- 2) K. Hori, C. Kubo, H. Okamoto, S. Takenaka.
Mol. Cryst. Liq. Cryst., in press

Table.1 Crystal data and R value

	F6	F7	F2
Formura	C ₂₃ H ₂₁ O ₃ F ₁₇	C ₂₄ H ₂₃ O ₃ F ₁₇	C ₁₉ H ₉ O ₃ F ₁₇
M.W.	668.39	682.42	608.251
T/K	200	200	200
Crystal System	Monoclinic	Monoclinic	Triclinic
Space group	P ₂ 1	P ₂ 1	P·1
a / Å	28.464(7)	29.822(5)	6.335(11)
b / Å	9.030(2)	8.9051(11)	30.210(3)
c / Å	5.1904(8)	5.1843(7)	5.992(7)
$\alpha / ^\circ$	90	90	90.29(9)
$\beta / ^\circ$	91.825(15)	92.374(12)	102.56(11)
$\gamma / ^\circ$	90	90	91.63(12)
V / Å ³	1334.9(5)	1375.5(3)	1119(3)
Z	2	2	2
D/g cm ⁻³	1.66	1.65	1.81
R	0.072	0.107	0.098

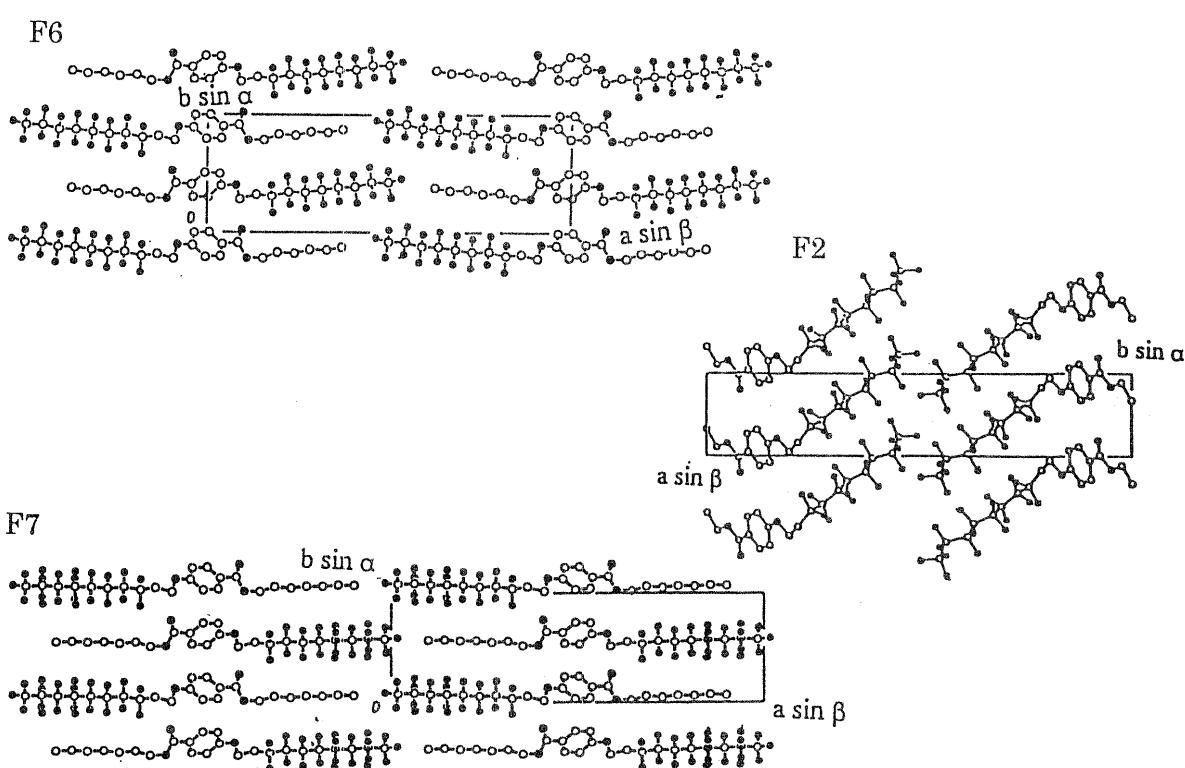


Fig.1 Crystal structures of F6, F7 and F2.