

3C01

ナフタレン系液晶性物質の結晶構造と液晶挙動

(お茶大院・人間文化) ○宮下宝・栗林美樹・堀佳也子

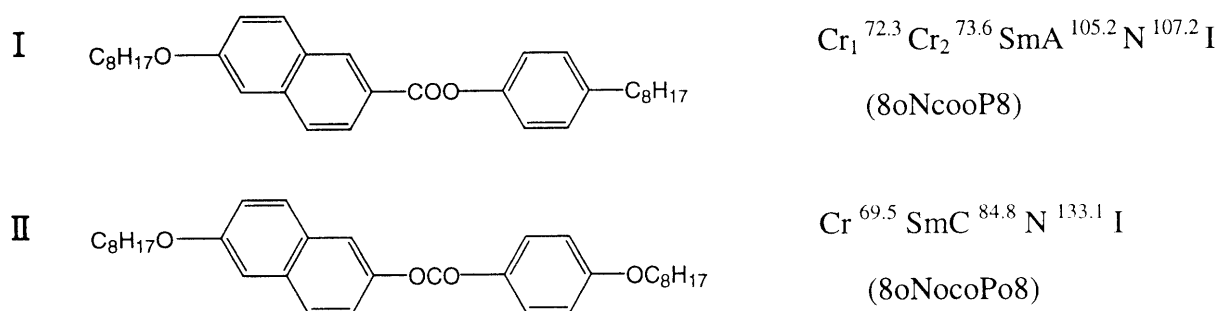
Crystal Structures and Liquid Crystal Behaviors of Mesogenic Naphthalenes

Takara MIYASHITA, Miki KURIBAYASHI and Kayako HORI (Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University, Otsuka, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8610)

In order to obtain information about intermolecular interactions controlling mesophases, we have tried to find the relationship between crystal structures and liquid crystal behavior. Crystal structures have been determined for two 2,6-disubstituted naphthalene derivatives with highly planar core moieties: 4-octylphenyl 6-octyloxy-2-naphthoate (I) and 6-octyloxy-2-naphthyl 4-octyloxybenzoate (II). In both crystals, the largely overlapped core moieties stack alternately, leading to smectic-like layer structures. The tilt angles of long molecular axes were estimated to be 30° (I) and 50° (II), which are related to their mesophases, SmA and SmC, respectively.

【緒言】

当研究室では、液晶相を規定する分子間相互作用に関する情報を得るために、結晶構造と液晶挙動との関係を見出す研究を行ってきた。特に一連のビフェニル系液晶性物質の結晶構造において、その末端鎖がアルキル基のものとアルコキシ基のものとを比較すると、パッキングに大きな差異が現れることが分かってきている¹⁾。本研究では、より高い平面性をもつナフタレンをコアにもつ2,6-二置換ナフタレン化合物に関し、以下の2つの物質について結晶構造解析を行ったので報告する。



【実験】

酢酸エチル/エタノール溶液から無色透明の板状晶を得た。回折データは CuK α 線を用いて AFC-7R 4 軸型自動回折計により測定した。結晶学データおよび最終R値を Table. 1 に示す。また D S C 測定および粉末X線回折実験により相系列を決定した。

【結果】

Fig. 1 および 2 にその結果を示す。分子構造について、物質 I はいずれの末端鎖も all-trans のコンフォメーションをとっている。一方、物質 II では末端鎖がコアに最も近いところでゴーシュ形をとっている。結晶構造について、いずれの物質でも隣接する分子は反平行に配列し、コアの部分が重なった層状構造をとっているが、物質 II では層間で末端のオクチロキシ基が互いに入り組んでおり、このことが層状構造の安定化に寄与しているものと考えられる。また物質 I および II について、層面に対する分子の傾斜角はそれぞれ約 30° および 50° となっており、傾斜角の大きさが液晶状態における SmA および SmC に対応しているものと考えている。

Table. 1 Crystal data and R value.

	8oNcooP8	8oNocoPo8
Crystal system	triclinic	monoclinic
Space group	$P\bar{1}$	$P2_1/a$
a / Å	10.155 (7)	19.738(2)
b / Å	25.805 (19)	8.448(2)
c / Å	5.853 (4)	20.121(3)
α / °	92.79 (6)	90
β / °	103.53 (5)	116.275(9)
γ / °	87.39 (7)	90
V / Å ³	1488.4 (1)	3008(1)
Z value	2	4
d / g cm ⁻³	1.09	1.11
R / %	8.11	7.98

Dihedral Angle between the planes (deg.).	
Plane	
I - II	3.1(8)
II - III	50.7(4)

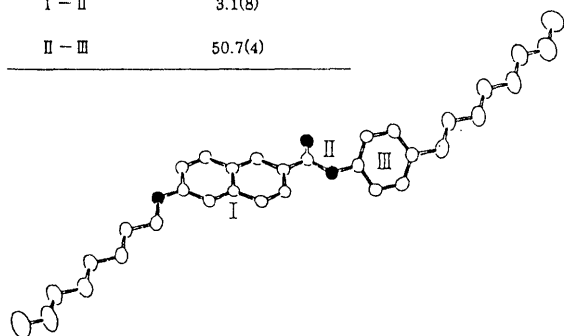


Fig. 1 8oNcooP8 (I)

Dihedral Angle between the planes (deg.).	
Plane	
I - II	78.70(15)
II - III	7.1(5)

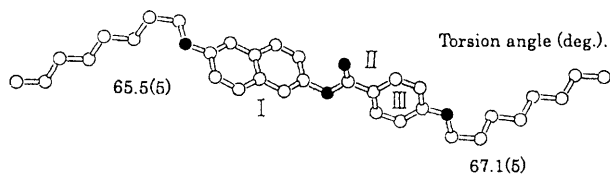


Fig. 2 8oNocoPo8 (II)

1) N. Seo and K. Hori, Liq. Cryst. in press

