

PBb02

## 液晶性物質、2-methylbutyl 4'-octyloxybiphenyl-4-carboxylate の結晶構造

(お茶大・院人間文化) ○ 松永 靖子、堀 佳也子

### Crystal Structure of 2-methylbutyl 4'-octyloxybiphenyl-4-carboxylate

Yasuko MATSUNAGA and Kayako HORI

(Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University,  
Otsuka, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8610)

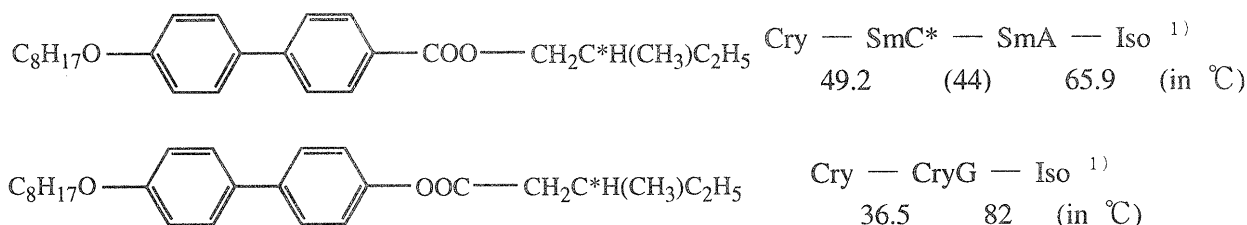
The title compound, 2-methylbutyl 4'-octyloxybiphenyl-4-carboxylate, exhibits the monotropic chiral smectic C phase in addition to the smectic A phase. On the other hand, the isomer with the reversed direction of the ester linkage exhibits the crystal G phase. In order to investigate the influence of the direction of ester linkages on liquid crystal phases, crystal structure has been determined for the title compound.

The molecule has a bent structure. The packing mode of molecules has a smectic-like layer structure, stacked in a zig-zag way. The molecules in a layer have an antiparallel arrangement every two molecules. The long axis of a molecule is tilted from the layer normal (20°).

#### [序論]

分子中の極性基の相対的な配向は、分子内または分子間相互作用に影響し、分子のパッキングを大きく支配し、液晶挙動を規定している。分子の熱運動の小さい結晶状態に関しては、X線結晶構造解析からその構造を明らかにすることができる。そこで我々は、結晶構造を規定する分子内または分子間相互作用を調べることによって、液晶挙動との関連性を見いだそうと試みている。

本研究で扱う表題物質は、SmA相に加えて、モノトロピック相としてではあるが比較的安定なキラルSmC相をとり、強誘電性液晶となるが、エステル向きが逆の異性体では、結晶状態に近いCryG相をとる<sup>1)</sup>。エステル結合の向きがもたらすこの顕著な相違を解明するために、これらの物質のX線結晶構造解析を試みた。今回は、表題の物質についての解析ができたので報告する。



#### [実験]

試料は常法により合成し、酢酸メチル+エタノール溶液から針状の単結晶を得た。回折データは、AFC7R型4軸自動回折計で、CuK $\alpha$ 線をX線源として測定した。

結晶データ、最終R値はTableに示す。

## [結果と考察]

分子構造を Fig.1 に示す。

結晶学的に独立な2分子が存在している。その一方の分子は、キラル鎖の部分が乱れた構造をとっている。(右図 C1~3)

分子中のアルコキシ鎖は、安定な all-trans のコンフォメーションをとっている。また、キラル鎖のメチル基は分子長軸方向に向き、エチル基が分子軸からはずれた方向に伸びていて、折れ曲がった構造をとっている。

パッキング図を Fig.2 および Fig.3 に示す。

Fig.2 より、分子は b 軸に沿って、層が積み重なった smectic 相類似の層状構造をなし、層内の分子は2分子ごとに反平行に配列している。

Fig.3 より、分子の長軸は bc 面内で約  $20^\circ$  傾いていて、一層ごとに向きを変えてジグザグ構造をなしている。

折れ曲がったキラル鎖はアルコキシ鎖に覆いかぶさるように配列し、層界面に位置している。

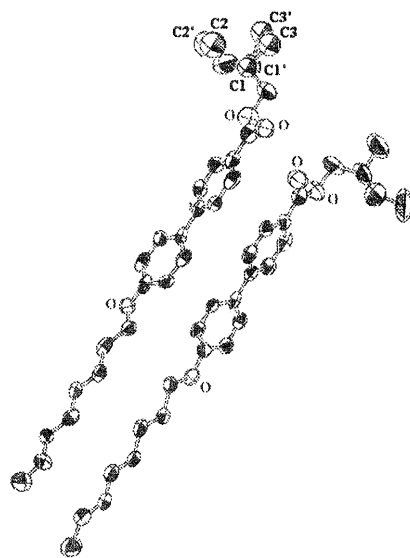


Fig.1 分子構造

Crystal System	Orthorhombic
Space Group	$P2_12_12_1$
$a/\text{\AA}$	15.09(1)
$b/\text{\AA}$	54.54(1)
$c/\text{\AA}$	5.90(1)
$\alpha/^\circ$	90
$\beta/^\circ$	90
$\gamma/^\circ$	90
$V/\text{\AA}^3$	4861(2)
Z value	8
$d_x/g\text{ cm}^{-3}$	1.08
R/ %	8.69

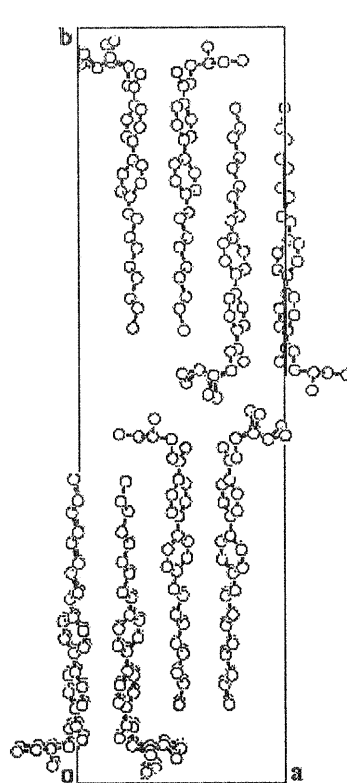


Fig.2 c 軸投影図

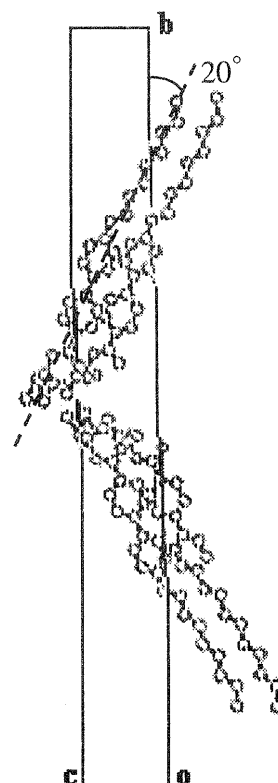


Fig.3 a 軸投影図

## [参考文献]

- 1) J. W. Goodby and T. M. Leslie [Liquid Crystals and Ordered Fluids ed By A.C.Griffin and Julian F. Johnson (Plenum Press, New York), Vol.4 (1984) p.1-32].