

3B10

シアノビフェニル系液晶性物質の結晶構造

(お茶大・院人間文化) ○ 栗林 美樹、堀 佳也子

Crystal Structures of Mesogenic Cyanobiphenyls

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

Cyanobiphenyls, nCB and nOCB, have been widely studied and are key materials to reveal the relationship between crystal structures and mesophase behavior. Crystal structures of nCB ($n \leq 5$, $n=9-11$) and nOCB ($n=1-10$, 12) were reported. Now, nCB ($n=6-8$) with low melting points have been determined at low temperature. The crystal of 7CB has a smectic like layer structure, which is similar to those of 9CB and 11CB. Crystal of 8CB has an imbricated structure, which is similar to that of 10CB. Crystal of 6CB does not have either packing mode. Thus, the structures of nCB ($n \geq 7$) show an even-odd effect. Compared with the reported crystal structures of nCB ($n \leq 4$), an interaction between CN groups and between CN group and biphenyl group is shown for n =even and n =odd, respectively. This tendency is quite different from that of nOCB.

《序論》

アルキルシアノビフェニル (nCB) およびアルコキシシアノビフェニル (nOCB) は、比較的簡単な分子構造をもつために、STM 観察や計算機シミュレーション等の手段を用いて幅広く研究されてきており、結晶構造と液晶挙動との関連性を解明するにあたって注目すべき物質である。結晶構造において、nOCB 系列については $n = 7-10$ 、12 でシアノ基間の 2 次元的相互作用による 2 分子層状構造が共通に現れることを見出している¹⁾。nCB 系列については、 $n \leq 5$ ²⁾ 及び $n = 9-11$ ³⁾ の構造はすでに報告されている。今回、低い融点をもつ $n = 6$ 、7、8⁴⁾ について低温での結晶構造解析を行い、系列全体の結晶構造の比較検討を行った。

《実験》

それぞれのエタノール溶液から、無色透明の板状晶(6CB、8CB)および柱状晶(7CB)を得た。回折データは Cu K α 線を用いて、AFC-7R 4 軸自動回折計により測定した。結晶学データ及び最終 R 値は、表 1 のとおりである。

《結果》

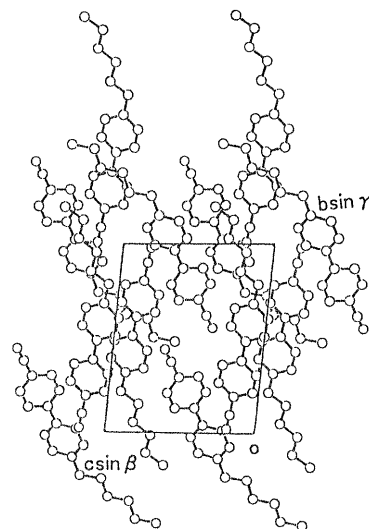
6CB、7CB、8CB の結晶構造を図 1、図 2、図 3 にそれぞれ示す。7CB は、アルキル鎖とコアが交互に積層した顕著な層状構造を

	6CB	7CB	8CB
T / K	200	240	240
Space Group	P-1	P-1	P2 ₁ /n
a / Å	12.427(4)	11.438(2)	14.939(3)
b / Å	12.724(3)	15.800(2)	6.078(4)
c / Å	10.857(2)	9.674(2)	16.740(2)
α / °	100.74(2)	99.000(12)	90
β / °	112.54(2)	107.164(11)	102.345(12)
γ / °	75.89(2)	91.062(11)	90
V / Å ³	1529.5(7)	1646.0(4)	1750.9(11)
Z	4	4	4
d / g cm ⁻³	1.144	1.119	1.106
Final R / %	4.73	4.71	4.91

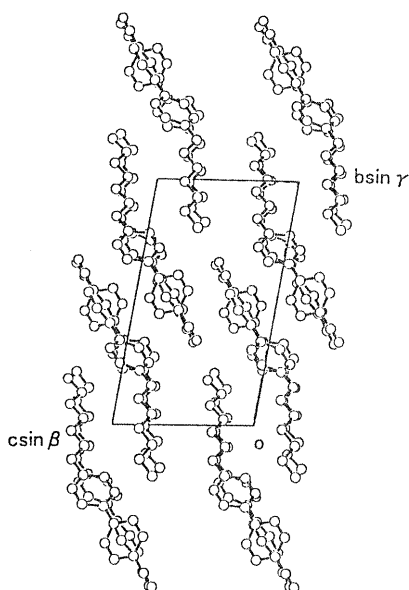
【表 1】

とっており、シアノ基は隣接する分子のビフェニル部分の近くに位置している。同様の構造は 9CB、11CB にも見出されている。一方、8CB ではシアノ基どうしが接しており、コアとアルキル鎖が入り組んだ構造をとっている。これは 10CB の構造と類似している。6CB は、どちらの構造のタイプにも属さなかった。したがって、 $n \geq 7$ の結晶構造に偶奇性が見られた。また、これまでに解析された n CB の結晶構造を含めて系統的に比較すると、 $n \leq 4$ においても、 n が偶数の場合はシアノ基間の相互作用、 n が奇数の場合はシアノ基とフェニルの間に相互作用が見られた。

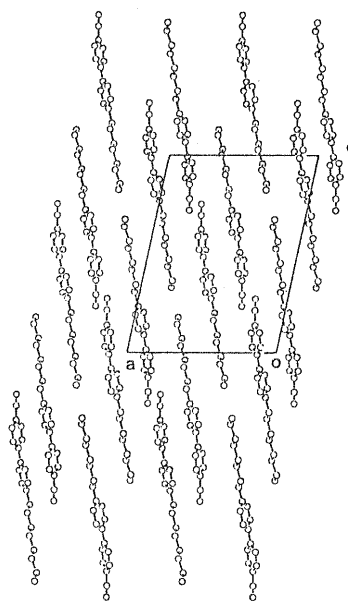
これらの結果を、 n OCB 系列と比較すると、 n CB 系列では、アルキル鎖の結晶構造に及ぼす影響がより強く反映していると言える。



【図 1 6CB】



【図 2 7CB】



【図 3 8CB】

- 1) K. Hori and H. Wu, *Liq. Cryst.*, in press 及び同所参考文献
- 2) T. Hanemann, W. Hasse, I. Svoboda and H. Fuess, *Liq. Cryst.*, **19**, 699-702(1995). 及び同所参考文献
- 3) T. Manisekaran, R. K. Bamezai, N. K. Sharma and J. Shashidhara Prasad, *Liq. Cryst.*, **23**, 597-601(1997). 及び同所参考文献
- 4) M. Kuribayashi and K. Hori, *Acta Crystallogr.*, in press