

トリアリールトリアジン誘導体の CH- π 相互作用による多孔性結晶の生成

(阪府大¹・リガク²) ○太田英輔¹・泉 遥¹・安澤英利子¹・大垣拓也¹・
松井康哲¹・佐藤寛泰²・池田 浩¹

Generation of Porous Crystal of Triaryltriazine Derivative Based on CH- π Interaction
(¹Osaka Pref. Univ., ²Rigaku) ○Eisuke Ohta,¹ Haruka Izumi,¹ Eriko Yasuzawa,¹ Takuya Ogaki,¹
Yasunori Matsui,¹ Hiroyasu Sato,² Hiroshi Ikeda¹

The crystal structures of triaryltriazine derivatives possessing three acridinyl or anthryl groups were elucidated. It was found that the acridinyl derivative crystallizes in a densely packed manner while the anthryl one forms a porous crystal in which molecules are arranged keeping long intermolecular distances as a result of CH- π interactions of anthryl groups.

Keywords: Molecular Porous Crystal; Clathrate Crystal; Fullerene; Crystal Engineering

近年、有機多孔性材料の新たな種類として、再結晶化により構造を再構築できる多孔性分子結晶が注目を集めている。しかし、一般に分子は結晶化で密に詰まろうとするため、大きな空孔をもつ多孔性分子結晶を得るのは未だ困難な課題である。本研究では、3つのアクリジニル基またはアンスリル基をもつトリアリールトリアジン誘導体 **1** および **2** (Fig. 1a) の結晶構造を解析し、**2** が極めて大きな空孔をもつ多孔性分子結晶を形成することを見出した。

化合物 **1** および **2** をトルエンおよびクロロホルムから再結晶し、X線結晶構造解析を行った。その結果、**1** は結晶中で分子が密に充填したパッキング構造を形成するのに対し、**2** の結晶のパッキング構造は疎であり、分子が互いに離れて一次元チャンネルが生ずることがわかった (Fig. 1b)。これは、**2** が結晶を形成するときにアンスリル部位が集合して4,5,10位の3点において強いCH- π 相互作用を発現するためと考えられる。また、C₆₀の存在下で**2**を結晶化したところ、複数のC₆₀分子をチャンネルに含む包接結晶が得られることもわかった (Fig. 1c)。

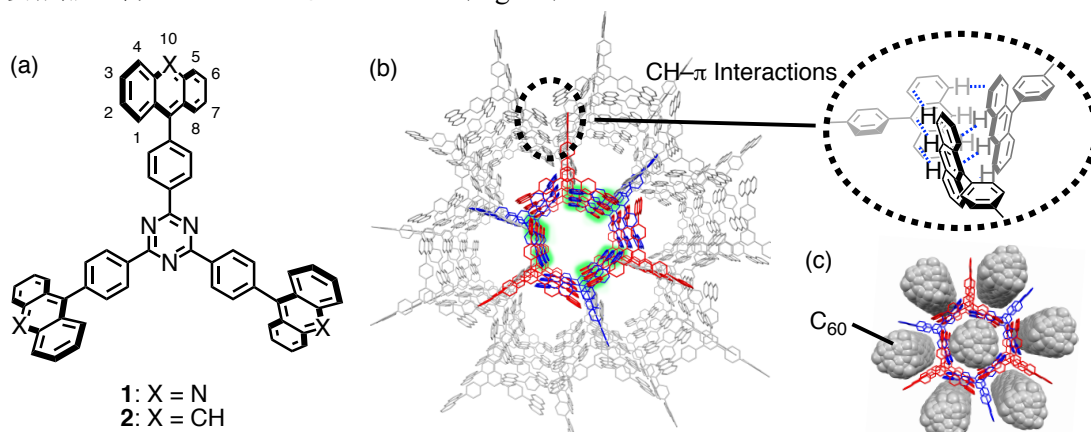


Fig. 1. (a) Molecular structures of **1** and **2**. (b) Packing structures of the crystal of **2** and (c) C₆₀-containing crystal of **2** determined by X-ray crystallographic analyses.