

キラルなベンゾイル修飾[2.2]パラシクロファン誘導体の結晶構造およびその発光特性

(奈良女大院理)○長谷川 結・三方 裕司・松本 有正

(Nara Women's University) ○Yui Hasegawa, Yuji Mikata, Arimasa Matsumoto

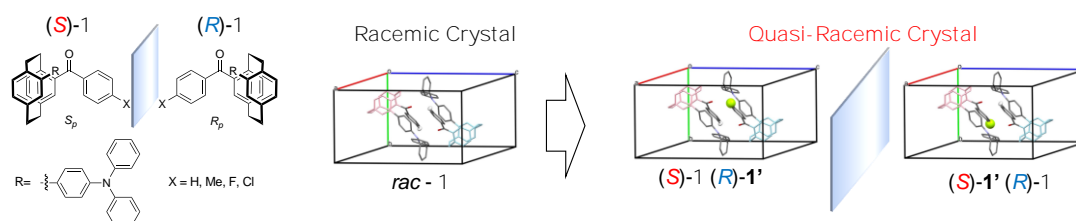
Crystal Structures and Fluorescence Property of Benzoyl Substituted Chiral

[2.2]Paracyclophane Derivatives

[2.2]Paracyclophanes have a characteristic structure in which two benzene rings are fixed in parallel in a close spaced position. This molecule is also attracting attention as a planar chiral molecule with a rigid backbone.^{1,2)} In this study, [2.2]Paracyclophane derivatives **1** with benzophenone group as acceptor and triphenylamine as donor were synthesized and subjected to asymmetric resolution using a chiral column. As a result, it was found that these derivatives formed isomorph crystal, and that quasi-racemic crystals can be obtained by crystallization of a mixture of two different derivatives with opposite steric configurations. The crystal structures and chiral optical properties of racemic and enantiopure and pseudo-racemic compounds will be presented.

Keywords: *Organic Crystal, Circular Dichroism, Fluorescence, Paracyclophane, Quasi-Racemate*

[2.2]パラシクロファンは二つのベンゼン環が空間的に近く平行に固定された特徴的な構造を持ち、また置換基の位置により剛直な面性キラリティーをもった分子となることから、その特徴的な物性の利用が注目されている^{1,2)}。本研究では、最近、遅延蛍光を示す化合物として報告された¹⁾[2.2]パラシクロファンにアクセプターとしてベンゾイル基、ドナーとしてトリフェニルアミンを導入した**1**の類縁体を合成し、キラルカラムを用いた不斉分割を行った。得られた誘導体の円二色性スペクトル、発光スペクトル、単結晶X線構造解析を行い、ラセミ体とエナンチオピュアな状態での結晶構造および物性の検討を行ったところ、これらの誘導体は置換基が異なっても同型の結晶を作り、さらに互いに逆の立体配置を持つ二種の異なる誘導体を混合して結晶化することで、擬ラセミの結晶が得られることが判明した。発表ではラセミ体とエナンチオピュアおよび擬ラセミ体の結晶構造およびキラル光学特性について報告する。



- 1) E. Spuling, N. Sharma, I. D. W. Samuel, E. Zysman-Colman and S. Bräse, *Chem. Commun.*, **2018**, 54, 9278–9281.
- 2) Y. Morisaki, M. Gon, T. Sasamori, N. Tokitoh and Y. Chujo, *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, 136, 3350–3353.