

アルキルアミド置換したデヒドロベンゾアヌレン誘導体の分子集合体構造と物性

(東北大院工¹・東北大多元研²・阪大院基礎工³) ○笠原 遥太郎¹・武田 貴志^{1,2}・久木 一郎³・芥川 智行^{1,2}

Molecular Assembly Structures and Physical Properties of Alkylamide-Substituted Dehydrobenzoannulene Derivative (¹*Graduate School of Engineering, Tohoku University*, ²*IMRAM, Tohoku University*, ³*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*)

○Yotaro Kasahara¹, Takashi Takeda^{1,2}, Ichiro Hisaki³, Tomoyuki Akutagawa^{1,2}

Hexadehydrotribenzo[12]annulene ([12]DBA) is a planar π -conjugated molecule with formation of transition metal complex and emission with large Stokes-shift. Design of molecular assembly of [12]DBA has a potential to show unique function. Herein, we prepared tetradecylamide-substituted [12]DBA (**1**) and investigated its molecular assembly and physical property. **1** was associated in CHCl_3 solution through hydrogen-bond of alkylamide groups. **1** formed organogel in heptane, and **1** formed crystalline state with hexagonal arrangement.

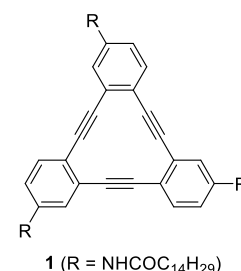
Keywords: Dehydrobenzoannulene; Molecular Assembly; Hydrogen-bond; Dielectric Property; Optical Property

ヘキサデヒドロトリベンゾ[12]アヌレン([12]DBA)は、遷移金属との錯形成能やストークスシフトの大きな発光を示す π 共役分子である。[12]DBA の置換基設計により、分子集合体構造を制御することで、新たな機能性を発現することができる¹。ベンゼントリアルキルアミド誘導体は、一次元のアミド水素結合によりコラムナー液晶相を示すことが報告されている²。本研究では、テトラデシルアミド基を有する[12]DBA 誘導体 **1** (図 1) を合成し、その分子集合体および物性を評価した。

1 の CDCl_3 中における ^1H NMR 測定において、濃度に依存したシグナルのシフトおよびブロードニングが観察された。 CHCl_3 中における IR スペクトルでは、アミド N-H 伸縮振動が 3320 cm^{-1} に観察された(図 2)。これらから、**1** は溶液状態で水素結合を介して会合し、超分子集合体を形成していると考えられる。**1** はヘプタン中、 -10°C でオルガノゲルを形成した(図 3a)。オルガノゲル中において、 365 nm の UV ランプを照射すると、[12]DBA に由来する発光を示した(図 3b)。PXRD 測定から、**1** の固相はヘキサゴナル配列を有していることが確かめられた。

1) Y. Kasahara *et al.*, *Chem. Commun.* **2021**, 57, 5374–5377.

2) Y. Matsunaga *et al.*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1986**, 141, 327–333.



1 (R = $\text{NHCOC}_{14}\text{H}_{29}$)

図 1 分子 **1** の構造

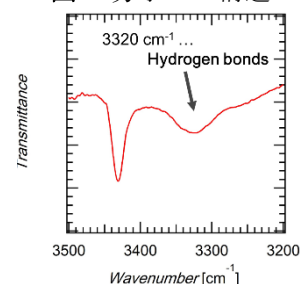


図 2 **1** の IR スペクトル (CHCl_3 , $4.25 \times 10^{-3}\text{ M}$)

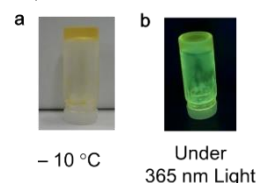


図 2 **1** のゲル化 (ヘプタン, 15 mM)