

特異な超分子構造を形成するシランポリオール類

(相模中研) ○田中 陵二

Unique Supramolecule Formation of Substituted Silanetriols (*Sagami Chemical Research Institute*) ○Ryoji Tanaka

To investigate the “Janus” character of silanepolyols, the crystal structure of 2,4,6-triisopropylphenyl-substituted silanetriol was investigated. The molecules formed a tubular hydrogen-bonded network in its crystal structure, with individual silicon atom riding on triple helices. This structure closely approximates the geometry known as the *Boerdijk–Coxeter–Bernal* helix. Also, the dehydration condensation from the solid state gave a different product than the dehydration condensation from the solution.

Keywords : Silanol; Hydrogen Bond; Janus Particle; BCB Helix; Supramolecules

マクロ粒子の両側面に異なる官能基を具有するヤヌス粒子は、外部環境に応答した特異な自己集合状態を形成可能なことから、近年盛んに研究が進められている。これをダウンサイズしたヤヌス分子は、異種官能基をそれぞれ複数個備え、剛直な骨格であればマクロ粒子と同様な集合挙動の発現が期待できる。本研究では、ケイ素上に水酸基を複数有するシラノール類が最小のヤヌス粒子として挙動し得ると予想し、有機基置換シラントリオール類の結晶構造を調査した。

かさ高い有機基として 2,4,6-トリイソプロピルフェニル基を有するシラントリオール 1 を合成し、ヘキサン-エーテル溶液から針状結晶を得た。この結晶構造は、分子が水素結合によりチューブ状の超分子構造を形成しており、三重らせん構造（疑似 10 回らせん軸）を有していた。ケイ素原子の幾何配列は、BCB らせん (*Boerdijk–Coxeter–Bernal helix*) と呼ばれる三重らせんに酷似する。これは初めての低分子の BCB らせん構造の報告例である。BCB らせん構造は線状最密充填構造で、マクロヤヌス粒子に特徴的な構造であるため、1 がヤヌス特性を発現していることを示唆する。さらに、1 の固相状態における部分縮合反応についても併せて報告する。

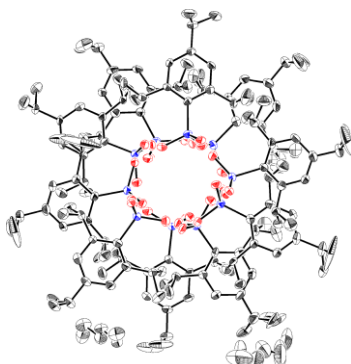


図 1. 1 の結晶構造 (*a* 軸方向).

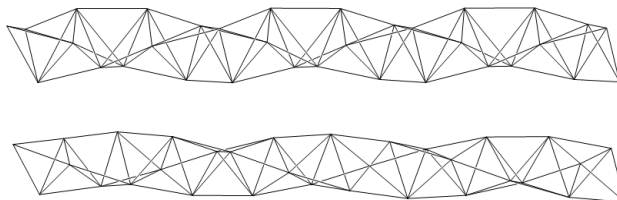


図 2. 1 の結晶構造中のケイ素原子の配列 (上) と理想的な BCB らせん (下)