

ハロゲン結合と嵩高いトリアルキルシリル基を用いた

結晶中のダイポールの配列制御

(北大院工¹・北大 WPI-ICReDD²) ○半妙 夏海¹・陳 旻究²・伊藤 肇^{1,2}

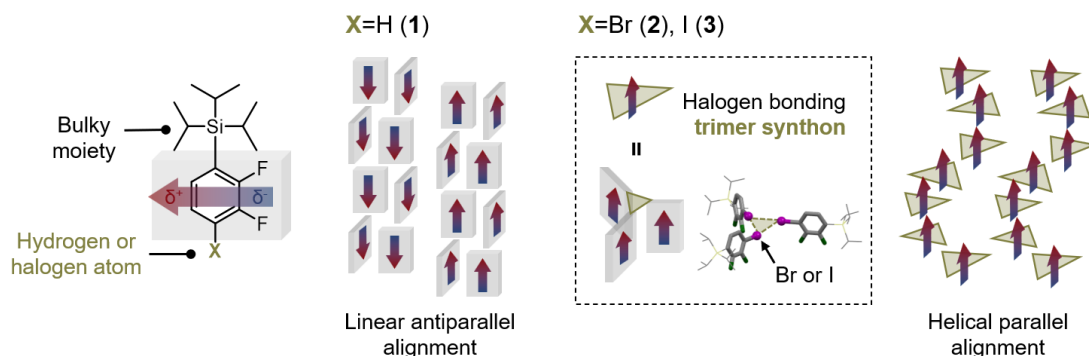
Dipole arrangement in molecular crystal by utilizing halogen bonding and bulky silyl moiety
(¹Graduate School of Engineering, Hokkaido University, ²WPI-ICReDD, Hokkaido University)

○Natsumi Hammyo,¹ Mingoo Jin,² Hajime Ito^{1,2}

The design of dipole arrangement in a molecular crystal has attracted much interest in the crystal engineering field because integrated dipoles can play important roles in determining the electronic or photophysical properties in solid state. Herein, we synthesized structurally asymmetric molecules **1–3** bearing polar 2,3-difluorophenyl group with a bulky silyl substituent on one side and a hydrogen (**1**) or a halogen substituent (**2, 3**) on the other side. Interestingly, in crystals **2** and **3**, the halogen substituents formed a triangle halogen supramolecular synthon by halogen bonding among bromine or iodine substituents, resulting in helical parallel alignment of the dipoles, while antiparallel alignment in crystal **1**. This simple modification of molecular structure allowed controlling the dipoles in the molecular crystal. In this presentation, we will report the detailed crystal structure and the arrangement of the dipoles.

Keywords : Organic molecular crystal; Dipole arrangement; Halogen bonding

分子結晶中のダイポールの配列は、電子物性や光物性を決定する上で鍵となる因子の一つである。本研究では、嵩高いトリアルキルシリル基を有する 2,3-ジフルオロフェニル基のパラ位に水素(**1**)、またはハロゲン置換基(**2, 3**)を有する分子を合成し、結晶構造を調べた。その結果、ハロゲン置換基がない **1** の場合には、ダイポールが直線に反平行配列した結晶が得られた。一方、ハロゲン置換基を導入した **2, 3** では、臭素またはヨウ素置換基同士がハロゲン結合を形成し、三量体構造が螺旋状に平行配列した極性キラル結晶が得られた。本発表では、これらの詳細な結晶構造とダイポールの配列について紹介する。



1) Salech, B. E. A.; Teich, M. C. *Fundamentals of Photonics*; Wiley-Interscience: New York, 1991.

2) Cavallo, G.; Metrangolo, P.; Milani, R.; Pilati, T.; Priimagi, A.; Resnati, G.; Terraneo, G. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 2478–2601.