

オクチルベンゾエート基を有するデヒドロベンゾアヌレン類の分子集積における環サイズの影響

(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}

Ring Size Effect for Molecular Assembly of Dehydrobenzoannulenes with Octylbenzoate Units (¹Graduate School of Engineering, Tohoku University, IMRAM, ³Graduate School of Engineering Science, Osaka University) ○Yotaro KASAHARA¹, Takashi TAKEDA^{1,2}, Ichiro HISAKI³, Tomoyuki AKUTAGAWA^{1,2}

Ring size of dehydrobenzoannulenes (DBA) is adjustable by changing the length of acetylene units. We recently reported the formation of thermally stable glass phase of hexadecahydrotribenzo[12]annulene with octylbenzoate units (**C₈[12]DBA**).¹ In this work, the molecular assemblies of dodecadehydrotribenzo[18]annulene with octylbenzoate units (**C₈[18]DBA**) has been discussed from the ring size effect of the molecular assemblies. DSC charts, POM images, and PXRD patterns of **C₈[18]DBA** were consistent with the formation of crystal phase. Therefore, DBA ring size significantly affected the molecular assembly of **C₈[n]DBA** ($n = 12$ or 18). The detail of the formation of molecular assemblies will be discussed. **Keywords** : Dehydrobenzoannulene; Molecular Assembly; Glass; Phase Transition; Ring size effect

デヒドロベンゾアヌレン(DBA)は、アセチレンユニットの長さや連結様式によって容易に環の形状とサイズの制御が可能である。我々はこれまでに、オクチルベンゾエート基を有する[12]DBA (**C₈[12]DBA**, スキーム1の $n = 1$)が、ガラス相を形成することを見出している^[1]。本研究では、同様の置換基と分子形状を保持したままより大きな環サイズを有する[18]DBA (**C₈[18]DBA**, スキーム1の $n = 2$)の分子集合体構造の評価を行い、**C₈[12]DBA** との比較検討からDBAの分子集積における環サイズの影響を検討した。

C₈[18]DBA の分子集合体構造を DSC・偏光顕微鏡(POM)(図1)・PXRD測定から行ったところ、室温で結晶相を形成することが明らかとなった。**C₈[12]DBA** と類似の分子構造を有するにもかかわらず、環サイズの変化により分子集合体構造が大きく変化した。発表では、両者の相違と分子間力の関係について議論する。

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

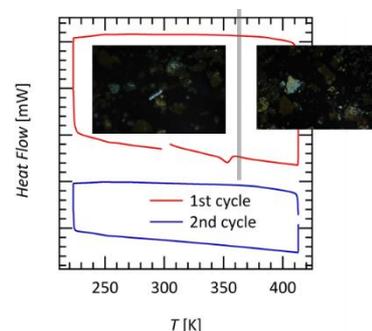
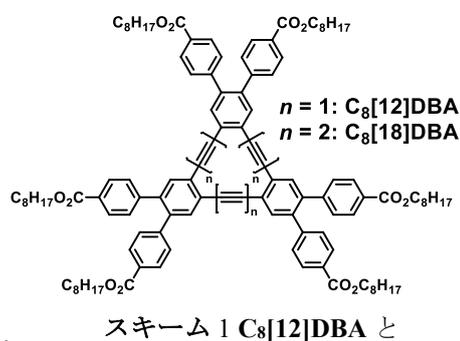


図1 **C₈[18]DBA** の DSC (挿入図: POM像, 左 RT, 右 370 K)