

末端修飾型ヘリセンが形成する Face-to-Face 型カラム結晶構造

(京大化研¹・さがけ²) ○張 政¹・村田 靖次郎¹・廣瀬 崇至^{1,2}

Face-to-Face Helical Columns Consisting of Homochiral End-Functionalized Helicenes
(¹*Institute for Chemical Research, Kyoto University*, ²*PRESTO, Japan Science and Technology Agency (JST)*.) ○Zheng Zhang,¹ Yasujiro Murata,¹ Takashi Hirose^{1,2}

Materials with high carrier mobility are necessary for preparing organic electronic devices, whereas studies on the molecular arrangements of chiral π -conjugated molecules and their carrier mobilities are limited. In this work, 2,1,3-thiadiazole rings and phenanthrene structures were introduced at the ends of helicenes and their homochiral crystal structures were investigated. A face-to-face helical columnar packing structure was observed due to the intermolecular interactions at the terminals.

Keywords : Carrier Mobilities; Chiral π -Conjugated Molecules; Helicenes; Columnar Packing Structures.

キラルな π 共役分子は、電子スピン選択性や円偏光に応答するキラル光電子デバイスへの応用が期待される¹⁾。これらのデバイス性能は分子集積状態に大きく依存すると予想されるが、ねじれた π 共役分子、特にらせん状分子の結晶構造制御については知見が限られている。本研究では、らせん状分子であるヘリセンの末端に 2,1,3-thiadiazole 環および phenanthrene 構造を導入した化合物のキラル結晶構造を、単結晶 X 線構造解析を用いて調査した (Figure 1)。ヘテロ[7]ヘリセン誘導体である (*P*)-TD[7]H²⁾では、C-H $\cdots$ π および C $\cdots$ S 相互作用を介した γ 型の結晶構造が認められた。一方、(*P*)-TD[9]H²⁾では、N $\cdots$ S、C $\cdots$ N 相互作用を介した β 型の結晶構造—face-to-face 型キラルカラム積層構造—が観測された³⁾。フェナントレン縮環型の (*P*)-1 では、 π - π 相互作用を介した β 型の結晶構造が認められた。本発表では、結晶構造の詳細と量子化学計算を用いた分子間相互作用およびキャリア移動度の評価について議論する。

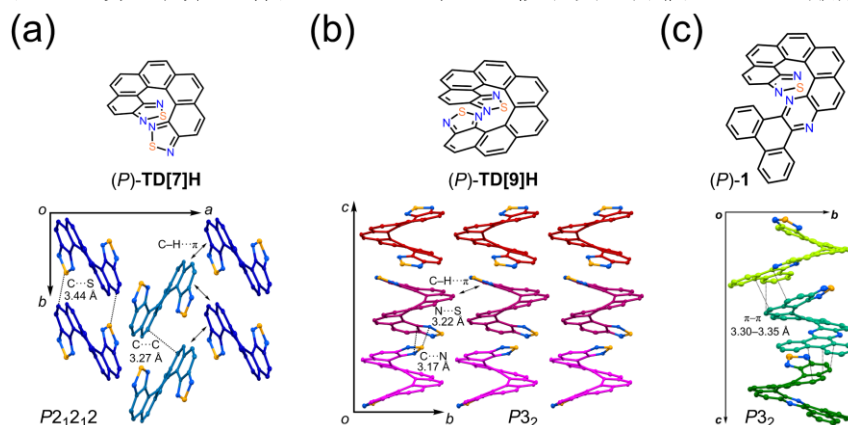


Figure 1. Single-crystal structures of (a) (*P*)-TD[7]H, (b) (*P*)-TD[9]H, and (c) (*P*)-1.

1) C. Zhang, X. Wang, L. Qiu, *Front. Chem.* **2021**, 9, 711488.

2) Z. Zhang, Y. Murata, T. Hirose, *Tetrahedron* **2023**, 142, 133514.

3) 張 政, 村田 靖次郎, 廣瀬 崇至, 日本化学会第 104 春季年会, 2024, E1122-3pm-06