

5,10,15-トリアルキル化トルキセン類の結晶構造と不斉光学特性におけるアルキル鎖長の効果

(阪大工¹・阪大院工²) ○中原 雄飛¹・石割 文崇²・佐伯 昭紀²

Effects of Alkyl Chains Branching from C₃ Chiral Truxenes on Circularly Polarized Luminescence and Crystal Structures (¹*Faculty of Engineering, Osaka University*, ²*Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Yuhi Nakahara,¹ Fumitaka Ishiwari,² Akinori Saeki,²

The *syn*-5,10,15-trisubstituted truxenes are an interesting class of molecules with chirality and bifacial structures. In the previous work, we have synthesized and enantiomerically resolved the C₃ chiral truxenes with benzylic substituents and revealed their excellent chiroptical properties. These truxenes exhibited high asymmetric factors (*g* values) in both circular dichroism (CD) and circularly polarized luminescence (CPL) and formed stacking dimers between enantiomeric pairs in their crystal structures. In this study, we synthesized and enantiomerically resolved several *syn*-5,10,15-trialkylated truxenes and investigated the effects of alkyl chain lengths on chiroptical properties and crystal structures.

Keywords : Truxene, Chirality, Bifacial, Circularly Polarized Luminescence, Crystal Structure

5,10,15 位に *syn* の立体配置で置換基を有するトルキセン類は、ユニークな二面性構造と不斉構造を併せ持つ C₃ キラル分子である (図 a)。当研究グループではこれまでに、種々の置換基 (図 b 左) を有する C₃ キラルトルキセン類の結晶構造解析 (図 c) および光学分割に成功し、その優れたキロプティカル特性を明らかにした^[1]。これまでに合成した誘導体 (図 b 左) では置換基によらず、ラセミ体の結晶中ではエナンチオマー同士がスタックしたダイマー構造をとっており、光学活性体は禁制遷移に基づき円二色性吸収 (CD)、円偏光発光 (CPL) において 10⁻² オーダーの大きな非対称性因子 (*g* 値) を示した (図 a)。今回我々は、C₃ キラルトルキセン類のキロプティカル特性および結晶構造におけるアルキル鎖長効果に興味を持ち、5,10,15 位に種々の鎖長のアルキル基を有する C₃ キラルトルキセン類 (図 b 右) を合成、光学分割し、分子分散状態および凝集状態における円二色性および円偏光発光特性を調査した。加えて、ラセミ体と光学活性体の単結晶 X 線結晶構造解析に成功し、アルキル鎖長効果について考察したので報告する。

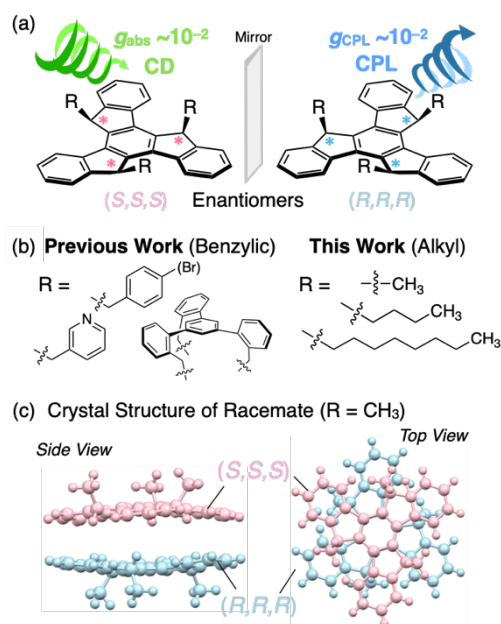


図. C₃ キラルトルキセン類の化学構造と結晶構造.

[1] T. Omine, F. Ishiwari *et al.*, *ChemRxiv*, 2024, *Preprint*, DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-m8drx.