

ハロゲンとメチル基を有するベンゼン誘導体結晶の曲がるメカニズムの解明

(*ICYS*¹・*ICYS*²)○姉帯 勇人¹・松下 能孝²・大村 孝仁²・竹内 正之²
 Study on the Mechanism of Bending in the Crystals of Benzene Derivatives with Halogen and Methyl Groups (*ICYS*, *NIMS*, *NIMS*) ○Hayato Anetai,¹ Yoshitaka Matsushita,² Takahito Ohmura,² Masayuki Takeuchi²

Organic crystals are attractive class of materials with high designability of their physical properties; in recent years, some organic crystals that bend like a wire in response to external stress have been reported. In order to form an unbreakable flexible organic crystal with desired functions, one should investigate the effect of the substituents in the π -electron compounds. In this research, we prepared single crystals of benzene derivatives with halogen or methyl groups as the model compounds and their flexibilities and mechanical properties were examined.

Keywords : Organic Crystals, Plastic Deformation, Halogen-halogen Interaction, π - π Stacking Interaction

有機結晶は物性の設計自由度が高い事から注目を集める材料であるが、有機結晶の多くは壊れやすく、その材料応用は困難である。近年、外部応力に対して針金のように曲がる有機結晶が数多く報告されている。例えば、ヘキサクロロベンゼン結晶では、塑性変形時にヘキサクロロベンゼン分子間の Cl-Cl 相互作用が再配向することで、優れた塑性変形を示す。¹そこで本研究では、モデル分子としてハロゲンまたはメチル基を有するベンゼン誘導体 (**Br0-Br6, I2**)の単結晶を作製し、柔軟性と機械的性質におよぼす π 電子化合物の置換基の効果を調べたので報告する。

Br0, Br1, Br2, Br3 結晶は室温で、**Br4, Br6, I2** 結晶は加熱時に、塑性変形した(Fig.1)。またこれらの結晶は、2方向に曲がる結晶(**Br0, Br1, Br3** :Group A)と1方向にしか曲がらない結晶(**Br2, Br4, Br6, I2** :Group B)に分類された。単結晶 X 線構造解析と Hirshfeld 表面解析より、この違いは分子間の π - π 相互作用の有無と関連していた。以上より、ハロゲンとメチル基を導入したベンゼン誘導体結晶は塑性変形を示し、かつその置換基の種類と数を変える事で、結晶の曲がり方を制御する事が可能となった。

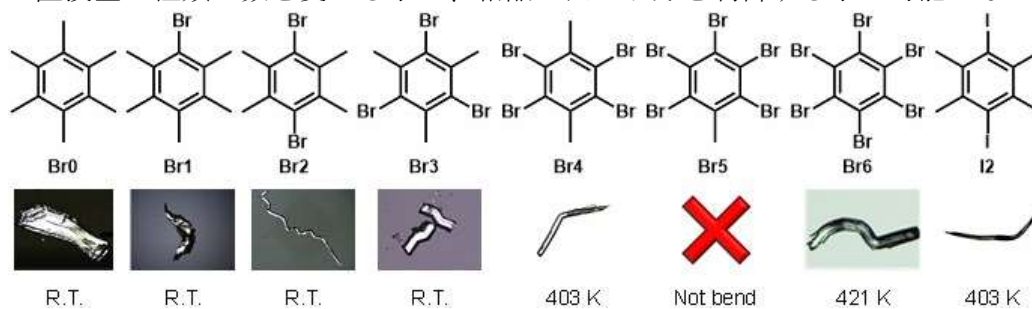


Fig.1 ハロゲンまたはメチル基置換ベンゼン誘導体の分子構造と結晶の曲げ試験

1) K. Panda, S. Ghosh, N. Yasuda, T. Moriwaki, G. D. Mukherjee, C. M. Reddy, P. Naumov, *Nat. Chem.* **2015**, *7*, 65–72.