

アントラセン結晶の熱的刺激を引き金とした分子ドミノ型単結晶—単結晶相転移

(高知工科大環境理工) ○樋野 優人・林 正太郎

Molecular Domino-like Single-Crystal-to-Single-Crystal Phase Transition of Anthracene Crystals Triggered by Thermal Stimuli (*School of Environmental Science and Engineering, Kochi University of Technology*) ○Yuto Hino, Shotaro Hayashi

To create polymorphism and various co-crystals, molecular design with structural configuration have attracted much attention. Rotatable phenyl-appended rigid anthracene, 1,8-bisphenylanthracene, is potential molecule into various crystals. We have successfully demonstrated selective crystal growth of 1,8-bisphenylanthracene into crystal polymorphs (**cI**, **cII**, **cIII**) under optimal crystallization conditions. Interestingly, the blue-emitting **cI** shows Single-Crystal-to-Single-Crystal (SCSC) phase transition to the thermodynamically stable green-emitting **cII** upon thermal treatment. We also achieved the observation of “domino-like SCSC phase transition” behavior. SCSC phase transition spontaneously occur when we gave thermally treated small phase transition (**cII**) domain on **cI**.

Keywords : Crystal Growth; Photoluminescence; Polymorphism; Anthracene; Phase Transition

分子の立体配座をデザインすることで、様々な熱力学的安定性を有する結晶の創製が可能になる。我々は剛直性を有するアントラセン骨格に回転性のあるフェニル基を結合させた 1,8-ビスフェニルアントラセンに着目した。この分子の結晶化条件を最適化することで様々な結晶多形 (**cI**, **cII**, **cIII**) を選択的に得ることに成功した。興味深いことに青色発光を示す **cI** に対し熱的刺激を与えることで緑色発光を示す熱力学的に安定な **cII** へ単結晶—単結晶 (SCSC) 相転移を示すことを見出した¹⁾。そこで、熱的に小さな転移ドメインを **cI** に与えたところ、時間経過によって相転移が結晶全体に自発的に広がるドミノ型 SCSC 相転移であることが明らかになった (**Figure 1**)。

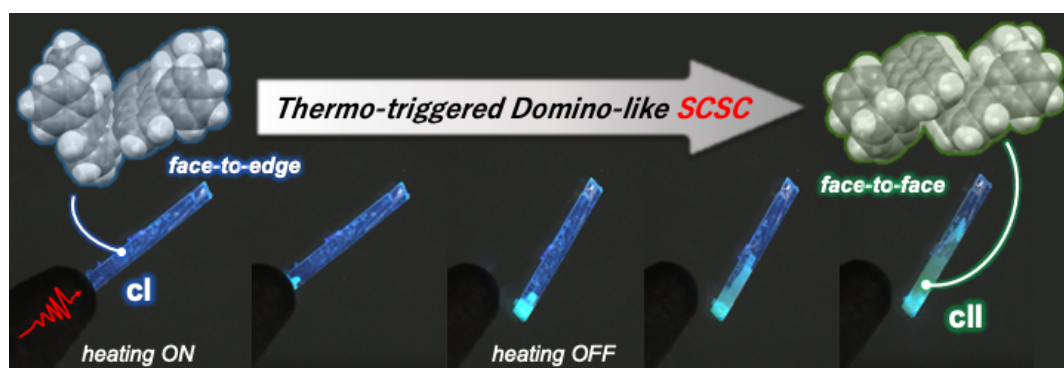


Figure 1. Thermo-triggered domino-like SCSC phase transition from **cI** to **cII**.

1) Y. Hino, S. Hayashi, *Chem. Eur. J.*, **2021**, *27*, 17595-17600.