

エラスティック結晶を形成するキサントンアジン誘導体の創製

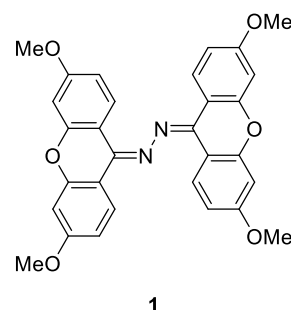
(福井大院工) ○小林 勝也・内藤 順也・徳永 雄次

Elastic Organic Crystal of a Xanthone Azine Derivative (*Graduate School of Engineering, University of Fukui*) ○Katsuya Kobayashi, Masaya Naito, Yuji Tokunaga

We prepared a hinge-like xanthone azine derivative **1**. The azine **1** formed two types of crystals: elastic one (**1S**) and brittle and inelastic one (**1H**). The crystal polymorphism of **1** was controlled by crystallization conditions. Single crystal XRD analysis of both crystals revealed that the flexibility of the elastic crystal originated from weak intermolecular CH-O interactions.

Keywords : Elastic Crystal; Polymorphism; Azine

π 共役系分子より成るエラスティック結晶は、光学特性や半導体性能を有する新たなフレキシブルデバイスへの応用が期待されている。エラスティック結晶の多くは、平面状分子のヘリンボーン積層を特徴とするが、分子の集合状態の予測が困難であることから、その構築は偶然によるところが大きい。本研究ではヘリンボーン構造を有するエラスティック結晶の戦略的な構築を目的に、2枚の π 共役平面を可動性のあるアジン結合で連結した、ちょうつがい型のキサントンアジン誘導体 **1** を設計した。本分子は弾性柔軟性を有する結晶 **1S** と脆く壊れやすい結晶 **1H** の2種類の結晶を形成した。我々はこれらの2種類の結晶構造を比較することで、結晶の柔軟性はヘリンボーン積層様式に加えて、結晶中での弱い分子間相互作用が鍵となることを見出した。



1 は溶媒蒸発法の制御により、応力負荷を加えた際に柔軟に弾性変形する黄色針状晶 **1S** (図1) と、剛直で破断する橙色針状晶 **1H** の2種類の結晶を形成した。単結晶 X線構造解析により、**1S** および **1H** はいずれも結晶中でヘリンボーン積層様式をとっていることが判明した。一方、**1S** は π 共役平面の積層カラム間で強い CH-O 相互作用と弱い CH-O 相互作用が共存していたのに対し、**1H** は強い CH-O 相互作用のみが部分的に存在していた。これらの結果より我々は、結晶に柔軟性をもたらす要素として、ヘリンボーン積層様式に加えて、応力負荷を加えた際に分子配座の微小変化を許容するための弱い分子間相互作用の存在が重要であると考えている。

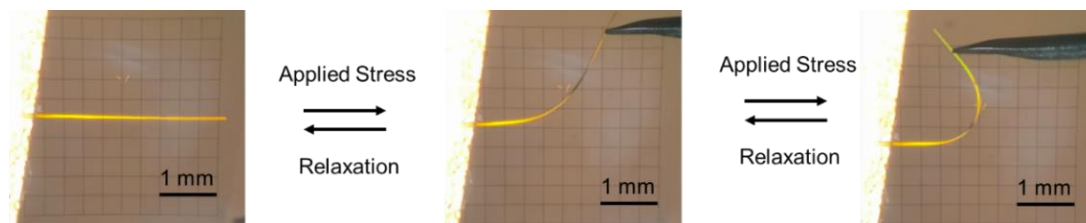


図1. キサントンアジン誘導体の結晶 **1S** に針で応力負荷を加えた際に変形する様子。