

フッ素化ベンゾジアゾール-ビチオフェンによる弾性分子結晶の創成

(高知工科大環境理工) ○矢野 圭悟・松尾 匠・林 正太郎

Creating elastic molecular crystal based on fluorinated benzothiadiazole and bithiophene
(*School of Environment Science and Engineering, Kochi University of Technology*) ○Keigo Yano, Takumi Matsuo, Shotaro Hayashi

Flexibility is one of the important functionalities in material science. However, it is well-known that molecular crystals are no flexibility. On the other hand, creating flexible molecular crystals is big challenge. Herein we report new elastic molecular crystals of a fluorinated benzothiadiazole-bithiophene oligomer. 4,7-Bis(2-thienyl)-5,6-difluoro-2,1,3-benzothiadiazole crystal was prepared by vapor diffusion method (chloroform: *n*-hexane= 1:1). Molecular rigidity and alternating donor-acceptor molecular structure induced columnar and slip-stacked structure giving flexible crystals. The obtained crystals showed yellow luminescence and elastic deformation.

Keywords : Elastic Molecular Crystals; Benzothiadiazole; Fluorescent

多くの有機分子系材料の優位性として柔軟性機能が挙げられる。しかし、有機分子結晶は、密な充填構造によりその多くが脆性として知られている。近年、非共有結合合成に基づく意図した結晶構造の制御による柔軟性分子結晶の創成が注目を集めている¹⁾。これまでに我々はフッ素化アレーンとチオフェンからなる π 共役系分子で弾性分子結晶の創成に成功している。本研究では、チオフェン D とフッ素化ベンゾジアゾール A から構成される DAD 分子を設計することで、その剛直性と交互構造に基づくカラムナー×スリップスタック構造の誘起により、弾性分子結晶創成を行なった。

合成した 4,7-bis(2-thienyl)-5,6-difluoro-2,1,3-benzothiadiazole (BTFT) の蒸気拡散法 (chloroform: *n*-hexane = 1:1) によりカラムナー×スリップスタック構造の結晶を得た。この結晶は、黄色発光を示し、ジグによる応力負荷試験を行なった結果、(001) 面および (100) 面への負荷に対し弾性変形を示した (Figure 1)。

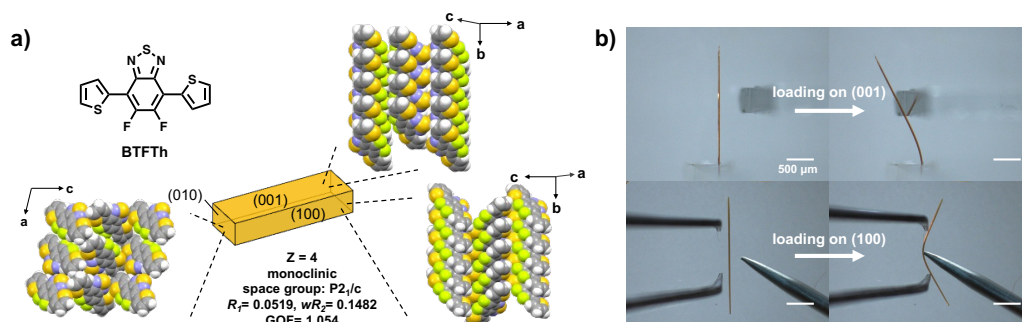


Figure 1. a) Crystal structure and b) elastic deformation of BTFT crystal.

1) S. Hayashi, A. Asano, N. Kamiya, Y. Yokomori, T. Maeda, T. Koizumi, *Sci. Rep.* **2017**, 7, 9453.