

相転移を示さない 5-Fluorobenzoyl-4-methoxyphenylethynyl-1-methylimidazole 結晶の Thermosalient 効果

(慶應大理工¹・東北大多元研²)○三浦 洋平¹・武田 貴志²・芥川 智行²・吉岡直樹¹
Thermosalient Effect of 5-Fluorobenzoyl-4-methoxyphenylethynyl-1-methylimidazole Crystal without Phase Transition (¹*Faculty of Science and Technology, Keio University*, ²*IMRAM, Tohoku University*) ○ Youhei Miura,¹ Takashi Takeda,² Tomoyuki Akutagawa,² Naoki Yoshioka¹

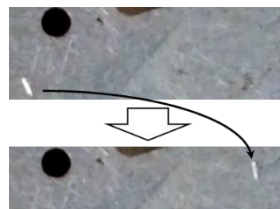
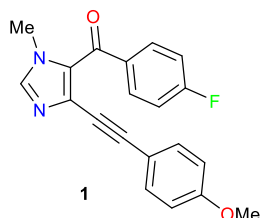
The thermosalient effect is the phenomenon that the crystal exhibits dynamic behavior like jumping or cracking by the thermal stimulus. The reason for the thermosalient effect of almost crystal is the phase transition due to change in the crystal structure. However, recently, a few numbers of the thermosalient crystal without phase transition has been reported.¹ The study of such a thermosalient effect is important to understand dynamic behavior crystals.

5-Fluorobenzoyl-4-methoxyphenylethynyl-1-methylimidazole (**1**)² exhibited a thermosalient effect at 80 °C by heating on a hotplate. However, there was no phase transition peak at DSC measurement and change in space group in the crystal structure. On the other hand, anisotropic change in the cell constants was revealed. It is considered that such cell constant change is the reason for the thermosalient effect. In the presentation, the mechanism of the thermosalient effect of the compound will be discussed.

Keywords : Thermosalient Effect; Organic Crystal; Imidazole; X-ray Crystal Structure Analysis

結晶が加熱や冷却などの熱的刺激により跳ねる、割れるなどの動的挙動を示す現象を thermosalient 効果と呼ぶ。Thermosalient 効果を示す結晶のほとんどは、その前後に相転移が見られ、結晶構造の変化が動的挙動の原因である。しかし、最近相転移を伴わない thermosalient 効果を示す結晶が数例報告され¹、そのメカニズムの研究は動的挙動を示す結晶を理解するうえで重要な課題である。

4-Fluorobenzoyl-5-methoxyphenylethynyl-1-methylimidazole(**1**)²の結晶をホットプレート上で加熱すると、80 °C でジャンプする thermosalient 効果を示した。しかしながら、示差走査熱量測定では相転移に由来するピークが見られず、X線結晶構造解析からも結晶構造の大きな変化は見られなかった。このことから **1** の結晶は相転移を示さない thermosalient 結晶である。一方、単位格子の異方的な拡大が見られ、これが thermosalient 効果を示す原因であることが示唆された。発表では **1** の thermosalient 効果のメカニズムについて詳細に議論する。



1) For example, T. Klaser *et al.*, *Crystals*. **2018**, 8, 301. 2) Y. Miura *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn* **2021**, 94, 2444