

1,3,5-トリアザ-7-ホスファアダマンタンのモノプロトン化体の結晶構造と相転移挙動

(山口大理¹・山口大院創成科学²) ○大坪由季乃¹・大石優希²・鈴木敦子²・綱島亮²

Crystal Structure and Phase Transition Behaviors of Monoprotonated 1,3,5-Triaza-7-Phosphoadamantane Salts (¹Yamaguchi University, ² Graduate School of Science and Technology for Innovation) ○Yukino Ohtsubo,¹ Yuki Ohishi,² Atsuko Masuya-Suzuki,² Ryo Tsunashima²

Molecular ionic crystals of hmtaH·X (X=Cl, Br, hmta=hexamethylenetetramine) exhibits ferroelectricity by rotational inversion of hmtaH¹⁾. Herein, similar salts with 1,3,5-triaza-7-phosphoadamantane (pta), instead of hmta, (ptaH·X, X=Cl, Br, I) was prepared. We investigated crystal structure, phase transition behavior and, dielectricity.

Keywords : Crystal Structure, Phase Transitions, Dielectricity

hmta(ヘキサメチレンテトラミン)をモノプロトン化したハロゲン化物塩 hmtaH·X(X=Cl, Br)は、分子配向の反転による強誘電性を示すことが知られている¹⁾。本研究では、hmta と類似した構造を有する一方、より低対称な分子である 1,3,5-トリアザ-7-ホスファアダマンタン(pta)に着目し、ptaH·X(X=Cl, Br, I)の作製とその結晶構造、相転移挙動、誘電性を調査した。ptaH·Cl と ptaH·Br では無極性な空間群 *Pnma* をとり、ptaH あたり 6 配位と、hmtaH·Cl、hmtaH·Br とは異なる構造であった(Figure1.)。ptaH·I は極性空間群 *Cm*、8 配位構造で結晶化した。これは hmtaH·I と同形である一方、hmtaH·I では見られなかった柔粘性結晶相への相転移が示唆された。hmtaH·X とは異なり、ptaH·X では結晶構造はアニオン種に依存し、新たに構造相転移を示すことが明らかとなった。当日は、結晶構造、相転移挙動、誘電性について ptaH·X と hmtaH·X の比較による考察を行う予定である。

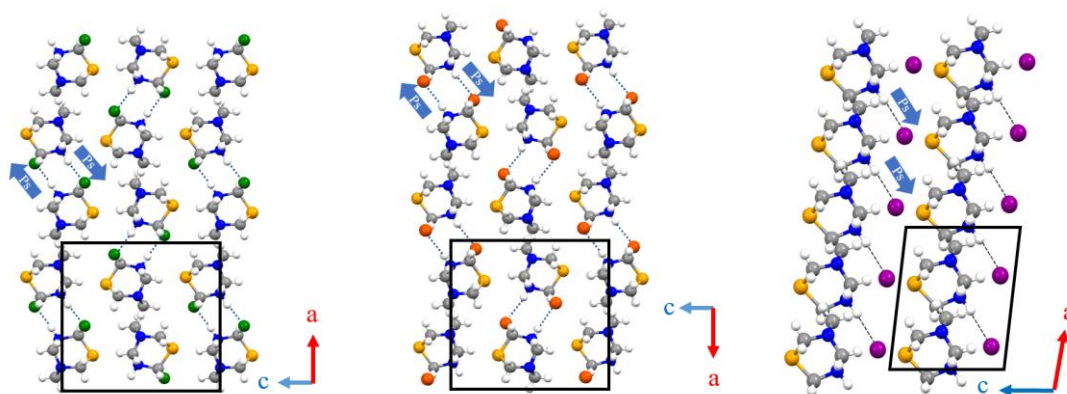


Figure1. ptaH·Cl、ptaH·Br、ptaH·I のパッキング図 (ac 面)

1) Yan-Xin Zhao, Kai-Ge Gao, Zi-Shuo Yao, and Jun Tao, *Inorg. Chem.*, **62**, 23, 8778–8783 (2023)