

巨大熱膨張を実現するアントラセン結晶の創製

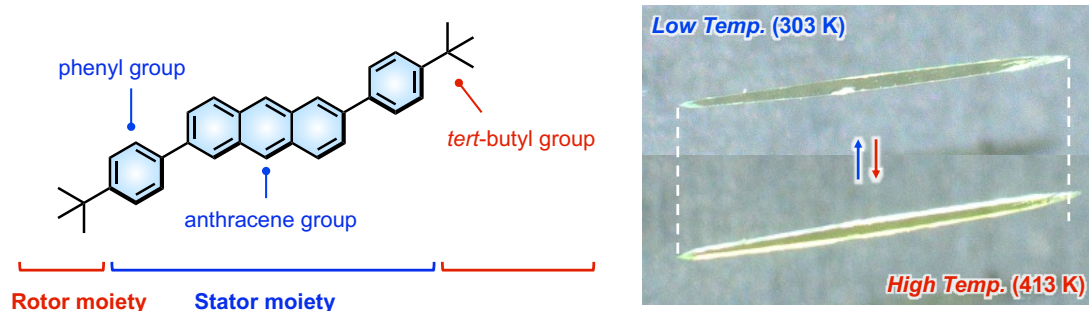
(高知工大院工¹・高知工大理工²・静大院総合科学³・静大理⁴) ○樋野 優人¹・松尾 匠²・是永 大樹³・関 朋宏⁴・林 正太郎²

An Anthracene Crystal for Its Giant Thermal Expansion (¹Graduate School of Engineering, Kochi University of Technology, ²School of Engineering Science, Kochi University of Technology, ³Graduate School of Integrated Science and Technology, Shizuoka University, ⁴Faculty of Science, Shizuoka University) ○Yuto Hino,¹ Takumi Matsuo,² Daiki Korenaga,³ Tomohiro Seki,⁴ Shotaro Hayashi²

The design for thermal expansion in a molecular crystal has attracted much interest in the sensors and actuators because the molecular motion in the solid state plays an important role in understanding the physical properties changes in solid materials¹⁾. Here, we designed and synthesized structurally rod-like anthracene molecules bearing phenyl group with a bulky tert-butyl substituent on the 2 and 6 positions. Interestingly, in a crystal structure, array order and disorder coexist was obtained by the stator moiety derived from the anthracene, phenyl groups, and the rotor moiety from the tert-butyl group. This molecular structure allowed giant thermal expansion and reversible stretching behavior. In this presentation, we report the detailed crystal structure and its thermal expansion observation.

Keywords : Anthracene; Molecular Rotor; Thermal Expansion; Reversible; Single-Crystal-to-Single-Crystal Phase Transition

分子結晶の熱膨張は、分子運動に基づく固体材料の物性変化を理解する上で重要な現象の一つである¹⁾。本研究では、嵩高い *tert*-ブチル基を有するフェニル基を 2,6 位に付与したアントラセンを合成し、結晶構造と熱応答性を調査した。その結果、アントラセンとフェニル基に由来するステーター部位と *tert*-ブチル基によるローター部位によって秩序性と乱れが共存した結晶構造が得られた。結晶は温度変化に対して、ある閾値で巨大熱膨張を示し、結晶形状の可逆的な伸縮挙動を示した。本発表では、これらの詳細な結晶構造と熱膨張性について説明する。



- 1) (a) M. K. Panda, T. Runčevski, S. C. Sahoo, A. A. Belik, N. K. Nath, R. E. Dinnebier, P. Naumov, *Nat. Commun.* **2014**, 5, 4811. (b) K. Kato, T. Seki, H. Ito, *Inorg. Chem.* **2021**, 60, 10849–10856.