

柔粘性を有するアダマンタン誘導体の合成

(関西学院大院理工) ○楠本もえ

Synthesis of Adamantane Derivatives with Plasticity (*Graduate School of Engineering, Kwansei Gakuin University*) ○Moe Kusumoto

Adamantane is known to form plastic crystals. In general crystals, the position and orientation of the particles are regularly aligned, but in the case of a plastic crystal, the position of the particles remains regular because melting occurs first with respect to the orientation from the crystalline state. In this study, we synthesized adamantane derivatives and investigated the effects on thermophysical properties when substituents are introduced into the adamantane skeleton. We investigated the use of machine learning to determine the correlation between thermophysical properties measured by differential scanning calorimetry (DSC) and dipole moments calculated by quantum chemical calculations for various substituted adamantane derivatives as an index for designing substituents.

Keywords : Adamantane derivative; Plastic crystal; Glass transition temperature

アダマンタンは柔粘性結晶を形成することが知られている。一般的な結晶では粒子の位置と配向が規則的に並んでいるが、結晶状態から配向について先に融解が起こって位置は規則的なままである状態のことを柔粘性結晶と呼ぶ。本研究ではアダマンタン誘導体を合成し、アダマンタン骨格に置換基を導入した場合の熱物性への影響を調べた。種々の置換アダマンタン誘導体の示差走査熱量 (DSC) 測定などによる熱物性測定値と量子化学計算によって求めた双極子モーメントなどの相関関係を機械学習により求めて、置換基設計の指標に活用することを検討した。また、単結晶X線構造解析を行い、置換基ならびに原子間の距離を測ることで、置換基による結晶性ならびに融点の差異を調査した。

