

原子・分子の自在配列と特性・機能  
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

関 朋宏

静岡大学 理学部  
講師

変形/運動するクロミック発光性分子結晶の開発

## § 1. 研究成果の概要

本研究では、外部刺激に応答する分子結晶を研究対象とし、特に外形変形や材料の運動を伴うクロミック発光性の分子結晶の開発を目指す。その中でも、変形や運動の前後の結晶構造を詳細に明らかにし、各種刺激応答性の起源を正確に理解し、材料科学の発展に寄与することを目指す。

ある金錯体からなる結晶に関し、機械的応力や温度変化に対し厳密な外形変形が可能であることが、それぞれ個別に明らかとなっていた。更に今回、機械的応力によって変形した結晶に対し、温度を変化させると、個別に各刺激を印加した場合とは異なる結晶の形状変形が可能であることを明らかにした。各刺激を印加する前後の単結晶構造解析から得られる構造情報をもとにして、この特異な変形挙動のメカニズムに関しても明らかにした(論文投稿済み)。

更に構造類縁体である錯体の結晶に関して、機械的刺激によって極めて大きな形状変形を認めすことを明らかにした。変形したドメインの面積と変形距離から300%を超える変形が可能であることを明らかにした。変形の程度は、結晶ごとに異なり、変形挙動が厳密なものではないという点で、上記の金錯体と異なっている。興味深いことに、大規模変形をした結晶の単結晶構造解析に成功し、変形したにも関わらずシングルドメインの単結晶であることが明らかとなった。現在その詳細な構造解析を行い、分子レベルでは秩序結晶構造を有していながら、マクロな大規模な結晶の自由変形が可能な理由を調査している。また、その特徴を厳密変形が可能な金錯体結晶と比較する。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “A New Structural Motif for NIR and Mechano-Thermochromic Emission: Gold(I) Iodide Complexes with a Thiazole-Based NHC Ligand”, submitted.
- 2) “Organic Shape Memory Effect through Multiple Thermal Phase Transitions Observed through Chromic Luminescence”, submitted.