

## 液晶性物質 4-cyano-4'-heptyloxybiphenyl (7OCB)と 4-cyano-4'-octyloxybiphenyl (8OCB)の結晶多形の相転移挙動

(お茶大理) ○折原礼子・前田美奈子・矢野恵・堀佳也子  
(名大工) 西堀英治・高田昌樹・坂田誠

### Phase Transition Behavior of Crystal Polymorphs of 4-Cyano-4'-Heptyloxybiphenyl (7OCB) and 4-Cyano-4'-Octyloxybiphenyl (8OCB)

Reiko Orihara, Minako Maeda, Megumi Yano, Kayako Hori  
(Department of Chemistry, Ochanomizu University)  
Eiji Nishibori, Masaki Takata, Makoto Sakata  
(Department of Applied Physics, Nagoya University)

X-ray diffraction studies on the phase transition behavior of crystalline polymorphs of 7OCB and 8OCB has been carried out by using synchrotron radiation at SPring-8. In 7OCB, it was confirmed that the square-plate crystal transformed to the needle crystal at 40 °C and the pattern of a new phase appeared at 50 °C, which changed to the pattern of the most stable phase at 52 °C. In 8OCB, the peaks of  $d = 3.58$  and  $1.81 \text{ \AA}$  decreased at 41 °C, while other peaks increased. Then, the pattern becomes only the most stable phase at 49 °C. We are now examining the cause of the drastic change at 41 °C.

#### <序論>

結晶多形は、分子間相互作用の複雑なバランスに起因する。標題の物質が、それぞれ4つの結晶多形を生じることが今までに分かっている。7OCBでは、針状晶、正方形板状晶、安定化の過程に現れる中間の固相、最安定相であり<sup>1)</sup>、8OCBでは、針状晶、正方形板状晶、平行六面体結晶、最安定相である<sup>2)</sup>。また、冷却速度を変化させることにより、異なった結晶形が現れることが報告されている<sup>3,4)</sup>。

本研究では、X線回折を用いて、これらの化合物の結晶多形について、相転移挙動を検討した。また、メルトからの降温速度を変えて作成した結晶について、別の結晶多形の存在の可能性について検討した。

#### <実験>

SPring8のBL02B2で、温度を変化させながらX線回折測定を $\lambda = 1 \text{ \AA}$ で行った。

#### <結果・考察>

Fig. 1は、7OCBの正方形板状晶の粉末試料を室温から昇温させた場合のX線回折パターンである。正方形板状晶のパターンは、40 °Cまで存在するが、これらのピークは42 °Cで消える。また、針状晶に相当するピークも生じ、このピークは47 °Cで消える。さらに、50 °Cで現れたパターンは、52 °Cで異なるパターンに変化するが、52 °Cのパターンは、最安定相のパターンと一致する。このことから、40 °Cで正方形板状晶相から針状晶相へ相転移し、44 °Cから47 °Cの間で針状晶相が消え、別の結晶相を経て、最安定相に転移することが分かった。

Fig. 2 は、80CB の平行六面体結晶の粉末試料を室温から 1 °C ずつ昇温させた場合の X 線回折パターンである。室温から温度を上げていくと、40 °C までは、ほぼ一定のパターンであった。41 °C では  $d=1.81$ ,  $3.58$  Å のピークは強度が減少するが、他のピークは増大した。これらのピークは、温度を上げていくと、49 °C までに完全に消え、最安定相のピークとなる。この 41 °C で大きくなるピークがどの相に帰属できるかは、現在検討中である。

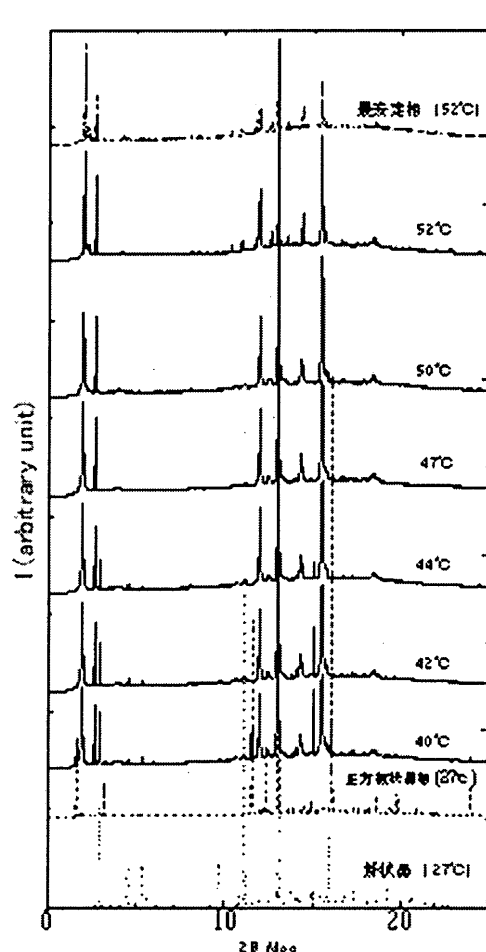


Fig. 1 70CB 正方形板状晶粉末試料を温度変化させたときの X 線回折パターン

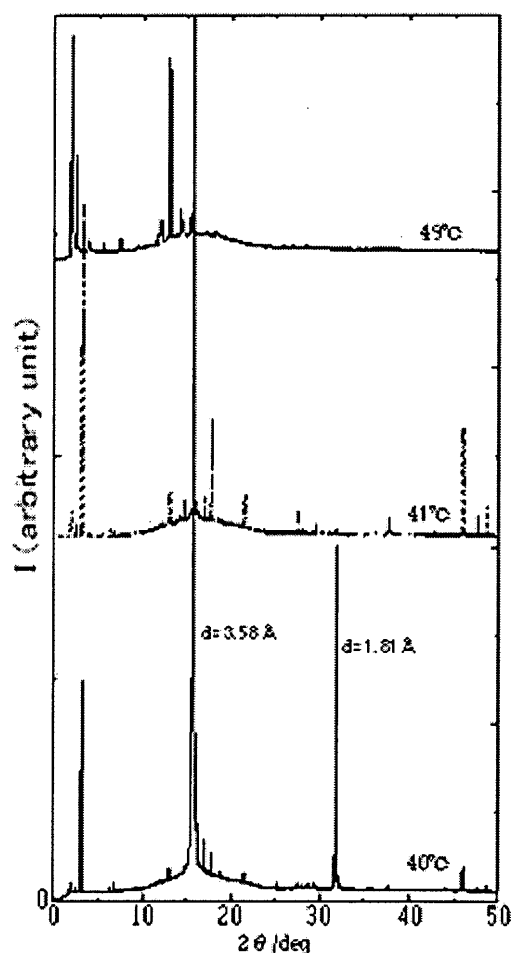


Fig. 2 80CB 平行六面体結晶粉末試料を温度変化させたときの X 線回折パターン

#### <参考文献>

- 1) K.Hori et al. Bull.Chem.Soc.Jpn.,69,891-897(1996)
- 2) K.Hori,H.Wu. Liquid Crystals.,Vol.26,No.1,37-43(1999)
- 3) S.C.Jain,S.A.A.Agnihotry and V.G.Bhide,Mol.Cryst.Liq.Cryst,88,281-294(1982)
- 4) S.C.Jain,S.A.A.Agnihotry and V.G.Bhide,Mol.Cryst.Liq.Cryst,104,161-171(1984)