

固体分子ギアを指向したジ(レゾルシルエチニル)トリプチセンの合成と結晶構造

(都立大院都市環境¹⁾) ○大山 宗土¹・稲垣 祐介¹・瀬高 渉¹

Synthesis and Crystal Structure of Di(resorcylethynyl)tritycene as a Candidate for Solid-state Molecular Gear (¹Tokyo Metropolitan University,) ○Shuuto Ohyama,¹ Yuusuke Inagaki,¹ Wataru Setaka¹

Since triptycene has a wheel-like structure, it can be used as a component for molecular gears. We have been tried to obtain crystalline molecular gear system by substituted triptycene, in which substituents can form hydrogen-bonded networks. Previously, our group reported resorcyiltritycene hydrate forms gearing linkage in a crystalline state by hydrogen-bonded networks of resorcyyl.¹ However, rotation of triptycyls was suppressed due to steric hindrance.¹ In this study, we have newly designed and synthesized di(resorcylethynyl)tritycene as a candidate for a crystalline molecular gear, because resorcyyl moiety can form hydrogen-bonded network. In fact, the desired compound was successfully synthesized, and single crystal having solvent molecules were obtained from recrystallization from tetrahydrofuran solution (Figure 1).

Keywords : *Molecular Machine, Molecular Gear, Triptycene, Hydrogen-bond Network, Organic Crystals*

トリプチセンはその歯車型の分子構造を有することから、これを組み合わせた分子ギアの部分構造としての利用が期待できる。そこで我々の研究室では超分子ネットワークの形成による結晶構造の制御を検討している。これまでに我々は、レゾルシルトリプチセンを合成し、結晶内でレゾルシル同士の水素結合ネットワーク形成によるトリプチセン間のギアカみ合いを観察していた¹⁾。しかしながら、この結晶中のトリプチセンは、水分子との立体接触により回転運動が阻害されていた。結晶水を除去するために水和物結晶を加熱すると、ギアカみ合いのない無水結晶へと転換することを明らかにした。

本研究では、トリプチセンの橋頭位にレゾルシルエチニル基を導入した分子を新規に合成し、レゾルシル同士の水素結合ネットワークを利用したトリプチセンの集合化を検討した。THF 溶液から再結晶することで、単結晶が得られた。その構造は溶媒分子の酸素が水酸基と水素結合しており、ネットワーク形成を阻害していた。(図1)。

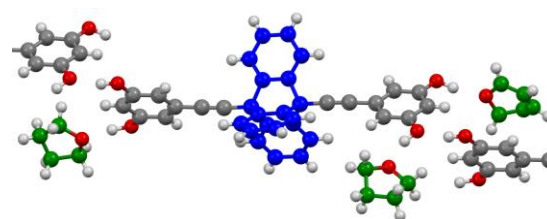


図 1. ジ(レゾルシルエチニル)トリプチセン-テトラヒドロフラン錯体の結晶構造

1) *Cryst. Growth Des.*, **2020**, 20(2), 1097-1102.