

三角形ベルト型分子の結晶構造と溶液中の圧力応答

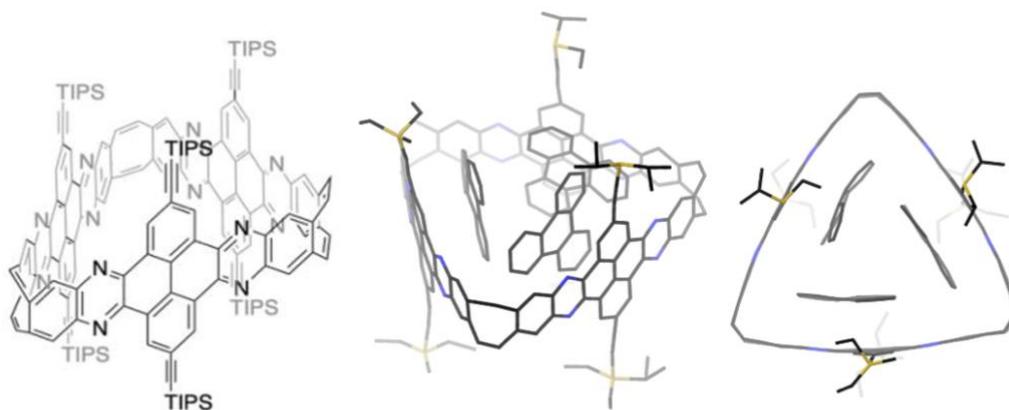
(京大院理¹・東工大理²) ○柴田祐貴¹・山角拓也¹・木下智和²・福原学²・齊藤尚平¹

Belt-shaped triangular molecule: Crystal structures and pressure responses (¹Graduate School of science, Kyoto University, ²Department of Chemistry, Tokyo Institute of Technology)○Yuki Shibata,¹ Takuya Yamakado,¹ Tomokazu Kinoshita,² Gaku Fukuhara,² Shohei Saito¹

We synthesized a belt-shaped triangular molecule that has nitrogen-introduced PAHs (polycyclic aromatic hydrocarbons) on the sides and COT (cyclooctatetraenes) rings on the corners. Single-crystal X-ray structure analysis revealed that the molecule has a large void that can accommodate three triphenylene molecules. High pressure absorption and fluorescence spectra have been analyzed in solution up to several hundreds of MPa, indicating an excited-state geometrical relaxation to a larger degree than in the atmospheric pressure.

Keywords: *Belt-shaped molecule; Mechanophore; Fluorescence; High pressure*

三角形の辺に窒素導入 PAH (多環芳香族炭化水素)、角に COT (シクロオクタテトラエン) 環をもつベルト型分子を合成した。単結晶 X 線構造解析から、分子内にトリフェニレン三分子が入る大きな空隙をもつことが分かった。分子内空隙をもつこの三角形分子は、溶液のような分散系であっても圧力に応答して単独で物性が変化するメカノフォアとして機能すると考えられる。実際、溶液に数百 MPa の圧力をかけて光学測定した結果、大気圧下よりも励起状態での構造緩和が大きいことが明らかになった。また、単結晶 X 線構造解析では、三角形分子が集合することで平面充填シートを構築し、さらにそのシートが積層したパッキング構造を与えた。



Trigonal Mechanophore

Figure. Preliminary X-ray crystal structure of **Trigonal Mechanophore** with three triphenylene molecules.