

## ダイポールを有する回転部位を導入した結晶性分子ギアの開発

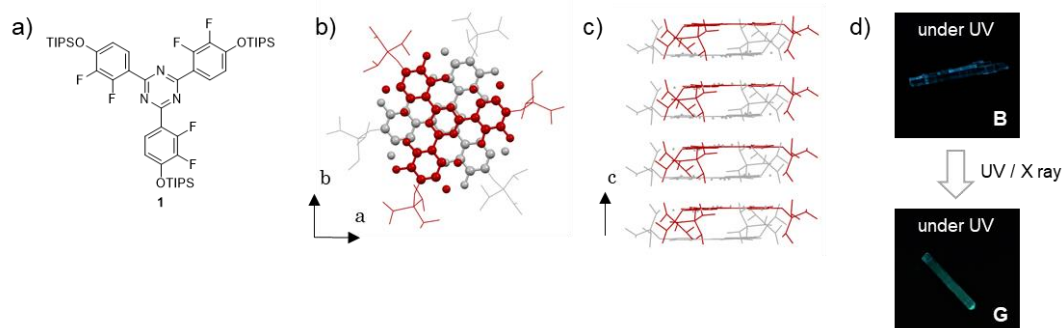
(<sup>1</sup>北大院工・<sup>2</sup>北大 WPI ICRReDD) ○半妙 夏海<sup>1</sup>・陳 旻究<sup>1,2</sup>・伊藤 肇<sup>1,2</sup>

Development of crystalline molecular gears with utilizing dipole-dipole interaction (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Hokkaido University, <sup>2</sup>WPI ICRReDD, Hokkaido University) ○Natsumi Hammyo,<sup>1</sup> Mingoo Jin,<sup>1,2</sup> Hajime Ito<sup>1,2</sup>

Crystalline molecular gear shows molecular correlated rotation in crystalline media. Such crystals have attracted attention because of the high potential for application to molecular machines. However, it is generally difficult to design the molecular gears in crystals. [1] Recently, we have developed a crystalline molecular gear by utilizing an inter-molecular packing structure of a 2,4,6-triaryl-1,3,5-triazine molecule in crystal. In this presentation, we will describe the introduction of the dipole-dipole interactions to the triazine-based crystalline molecular gears. Single crystal X-ray diffraction analysis revealed that the crystal of the molecular rotor **1** with dipole in the phenylene rotator forms the inter-locked structure in dimers along the *c*-axis, and the dimers were packed in a straight column (Figure b and c). The clear geared molecular rotation was observed by solid-state NMR studies. In addition, it was observed that the luminescence properties of crystal **1** changed by single crystal XRD or UV irradiation (Figure d).

**Key words:** Organic molecular crystal, Crystalline molecular rotor, Dipole-dipole interactions

結晶中で分子やその一部が回転運動を示し、さらに隣り合う分子同士が互いに連動してギア運動を示す結晶を結晶性分子ギアと言う。この結晶は分子マシンへの応用が期待されているが、その設計指針は未だ明確ではない。最近我々は、トリアリールトリアジン骨格を有する分子ローターが結晶内で分子間の連動回転を示すことを見出しており、本発表では回転部位にダイポールを導入した結晶性分子ギアの開発に成功したことについて報告する。単結晶 X 線構造解析により、ダイポールを有する分子ローター **1** の結晶は、ダイマーが *c* 軸方向にまっすぐ積層した構造をとっていることが確認され、固体 NMR 測定によって結晶内で連動したギア運動を示すことが確認された（下図 b, c）。また、**1** の結晶は UV 照射および単結晶 XRD 測定によってその発光特性が変化することが観察された（下図 d）。



[1] Liepuoniute, I.; Jellen, M. J.; Garcia-Garibay, M. A. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 12994.