

## 複数のトリアルキルシリル基を持つトリアリールトリアジンの結晶中における多彩な配列構造と固体発光特性

(北大院工<sup>1</sup>・北大 WPI ICRReDD<sup>2</sup>) ○伊藤 貴裕<sup>1</sup>・吉津 龍之介<sup>1</sup>・陣 旻究<sup>2</sup>・伊藤 肇<sup>1,2</sup>

Various intermolecular arrangements of triaryltriazine derivatives bearing different trialkylsilyl groups in crystals and the emission properties (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Hokkaido University, <sup>2</sup>WPI ICRReDD Hokkaido University) ○Takahiro Ito,<sup>1</sup> Ryunosuke Kitsu,<sup>1</sup> Mingoo Jin,<sup>2</sup> Hajime Ito<sup>1,2</sup>

In general, triaryltriazine derivatives show strong intermolecular  $\pi$ - $\pi$  interaction, forming one-dimensionally stacked intermolecular packing structure in crystal. Recently, we revealed that the introduction of bulky substituents into the triaryltriazine inhibits the formation of intermolecular  $\pi$ -stacked structures originated by intermolecular steric repulsion and induces to form intermolecularly crossed packing mode in the crystal. In this study, we applied various trialkylsilyl groups as the bulky substituents to investigate a key factor to determine the molecular arrangements in solid state. We utilized five trialkylsilyl groups as the substituents and synthesized various types of triphenyl triazine derivatives possessing multiple trialkylsilyl moieties. Crystal structures of the derivatives were revealed by single crystal X-ray diffraction analysis. We found that triaryltriazine forms different molecular arrangements in crystals by changing substituents at the side position. In addition, we observed the solid-state emission properties of some crystals changed by UV irradiation.

**Keywords:** molecular crystal; triaryltriazine; solid-state emission property

トリアリールトリアジンは、分子間で働く強い  $\pi$ - $\pi$  相互作用により、主に一次元的に分子間が繋がった集積構造を形成する。一方、最近我々は、その末端にかさ高い置換基を導入することで、結晶化の際に分子間の立体反発により分子間  $\pi$  スタック構造の形成が阻害され、分子間で 3 つのアリール基が 60° ずれてスタックする分子間クロススタック構造を形成することを見出した(下図)。本研究では、その置換基に様々なトリアルキルシリル基を導入し、結晶中で多様な分子配列を形成することを調査した(下図)。トリアリールトリアジンの末端に全て同じシリル基を導入したもの、一つだけ異なるシリル基であるもの、全てが異なるシリル基であるものを系統的に合成し、それぞれの結晶について単結晶 X 線構造解析を行った。興味深いことに、トリアリールトリアジンの分子間クロススタック構造が末端の置換基の違いによって精密に調整された(右図)。また、一部の結晶については UV 照射により固体発光色が変わることが観察され、本発表にてその詳細を述べる。

