

## 水素結合の組み換えをともなう多孔質構造体の単結晶構造転移機構

(阪大院基礎工) ○久保遥・桶谷龍成・久木一朗

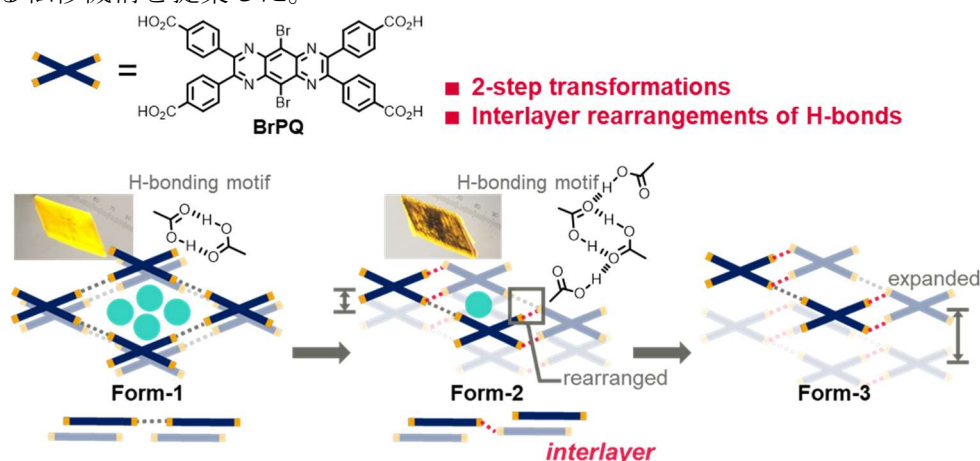
A Newly Proposed Mechanism for Single-Crystalline Transformation of Porous Framework Involving Hydrogen Bonding Rearrangements (*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○Haruka Kubo, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki

Hydrogen-bonded organic frameworks (HOFs), porous molecular crystals formed through intermolecular hydrogen bonds, are expected to exhibit dynamic behaviors based on reversible hydrogen bonds. We have constructed a layered HOF with stacked 2D porous sheets composed of X-type tetracarboxylic acid derivative **BrPQ**<sup>[1]</sup>. It was revealed that this HOF underwent two-step quasi single-crystal-to-single-crystal structural transformations. The structures of each phase were clarified by single-crystal X-ray diffraction analysis, and furthermore, we proposed a new transformation mechanism in which the pores shrink significantly as interlayer rearrangements of hydrogen bonding via desorption of guest molecules.

**Keywords :** Single-crystal-to-single-crystal Transformation; Molecular Crystal; Porous Material; Hydrogen-bonded Organic Frameworks; Carboxylic Acid

水素結合により分子を集積させた多孔質構造体 (Hydrogen-bonded Organic Frameworks; HOFs) は、可逆な水素結合の形成または解離により構造や物性の動的な変調を示すことが期待される。例えば、X型のテトラカルボン酸誘導体で構成されたHOFが、ゲスト分子が脱離する際に水素結合の組み換えをともなう構造変化を示す例が報告されている。しかしながら、その転移機構については言及されていない。

我々は、X型のテトラカルボン酸誘導体 **BrPQ** を用いて、2次元多孔性シートが積層した層状HOFを構築した。このHOFは、熱により脱ゲストを伴う2段階の単結晶構造転移を起こすことを見出した。さらに、単結晶X線構造解析により明らかにした各段階の構造をもとに、シート層間で水素結合が組み換わることによって空間が収縮する転移機構を提案した。



[1] Kubo, H.; Oketani, R.; Hisaki, I. *Chem. Commun.* **2021**, 57, 8568.